

**Experimentelle und mathematische Modellierung
der Festbettvergasung
am Beispiel der Gleichstromvergasung von Holzhackschnitzeln**

ein Beitrag zur Erhöhung der Prozeßtransparenz

Von der Fakultät Maschinenwesen der
TECHNISCHEN UNIVERSITÄT DRESDEN

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktoringenieur (Dr.-Ing.)
angenommene Dissertation

Dr.-Ing. Martin Schneider
geb. am 26.09.1974 in Bautzen

Gutachter: Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. P. G. Gilli
Prof. Dr.-Ing. habil. W. Toufar
Prof. Dr.-Ing. habil. J. Zschernig

Tag der Einreichung: 6. August 2002
Tag der Verteidigung: 17. Februar 2003

Prof. Dr.-Ing. habil. A. Dittmann
Vorsitzender der Prüfungskommission

Kurzreferat

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Erhöhung der Prozeßtransparenz der Festbettvergasung. Es besteht einerseits eine große Wissenslücke, welche einen durchschlagenden Erfolg für den Brennstoff Holz bisher verhinderte. Andererseits besitzt die Technologie ein energiewirtschaftlich bedeutendes und unter den gegenwärtigen politischen Rahmenbedingungen betriebswirtschaftlich hohes Potential.

Ein Modellvergaser war mit umfangreichen Meßmöglichkeiten ausgerüstet. Mittels daran angepaßter Probenahmeverrichtungen konnten in den Untersuchungen auf der Basis von 16 Stützstellen zweidimensionale Profile der Temperatur und der Gaszusammensetzung ermittelt werden. Die Partikelproben aus drei Meßebenen gaben Auskunft über den Trocknungs- und Pyrolysefortschritt sowie über den Koksumsatz.

Parallel erfolgte die Erarbeitung einer Mathematischen Modellierung. Hier wurde eine kommerzielle Strömungssimulations-Software mittels Unterprogramme an die Anforderungen der Festbettvergasung angepaßt.

Im Vergleich der Ergebnisse aus Experiment und Simulation konnte der Reaktionsablauf dargestellt, sowie Einflüsse verschiedener Parameter auf den Prozeß diskutiert werden.

Abstract

The aim of the present work about experimental and mathematical modelling of fixed-bed-gasifiers is to increase the transparency of the process.

At Dresden University of Technology a gasifier with a high number of measuring points was used. Two-dimensional profiles of temperature and gas-concentrations were analysed. Samples of particles taken out of the reactor gave information about drying, pyrolysis and char-reactions.

A commercial CFD-software was modified for the special application of fixed-bed-gasifiers by subroutines.

Comparisons of the results of experiment and simulation showed the constitutive process with its significant reaction-behaviour. By variation of different parameters, important influences were discussed.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit wurde während eines Forschungsstudiums am Lehrstuhl Kraftwerkstechnik des Instituts für Energietechnik der Technischen Universität Dresden im Rahmen des Graduiertenkollegs „LIES - Lokale innovative Energiesysteme“ angefertigt.

Angeregt und richtungsweisend betreut wurde sie durch Herrn Prof. Bernstein, der noch vor Abschluß der Arbeit verstarb. Ihm gilt besonderes Andenken und nacheilender Dank.

Danken möchte ich seinem Nachfolger, Herrn Prof. Gilli, für die Förderung zur Vollendung der Arbeit sowie für die Erstbegutachtung.

Herrn Prof. Toufar gilt Dank für die helfenden Diskussionen, bei denen er mich an seinem umfangreichen Erfahrungsschatz auf dem Gebiet der Festbettvergasung teilhaben ließ, und für die Übernahme des Koreferats.

Ebenfalls für die Begutachtung sowie für den über fachliche Fragen hinausgehenden Kontakt danke ich dem Institutsleiter, Herrn Prof. Zschernig.

Wichtige Unterstützung wurde mir von Mitarbeitern und studentischen Hilfswissenschaftlern des Lehrstuhls zuteil, für deren gute Zusammenarbeit ich danke.

Finanziell ermöglicht wurde die Arbeit durch staatliche Förderungen, im wesentlichen über die Sächsische Aufbaubank und die Deutsche Forschungsgemeinschaft.

Besonders danken möchte ich meinen Eltern, die allem die Basis gaben.

Dresden, August 2002

Martin Schneider

Inhaltsverzeichnis

| | Seite |
|--|-------|
| Inhaltsverzeichnis | I |
| Abbildungsverzeichnis | IV |
| Tabellenverzeichnis | VII |
| Anlagenverzeichnis | VIII |
| Formelzeichen und Abkürzungen | IX |
| | |
| KAPITEL 1 - EINFÜHRUNG | 11 |
| 1.1 Vergasung | 11 |
| 1.2 Motivation zur Vergasung im kleinen Leistungsbereich | 13 |
| 1.3 Entwicklungsstand der Festbett-Vergasungstechnologie | 15 |
| 1.4 Stand der experimentellen Modellierung | 16 |
| 1.5 Stand der mathematischen Modellierung | 17 |
| 1.6 Forschungsstand an der TU Dresden | 18 |
| 1.7 Inhalt der Arbeit | 21 |
| | |
| KAPITEL 2 - EXPERIMENT | 22 |
| 2.1 Vergasungsanlage | 22 |
| 2.1.1 Anlagenbeschreibung | 22 |
| 2.1.2 Steuerung und Regelung | 24 |
| 2.1.3 Reaktor | 26 |
| 2.2 Probenahme | 28 |
| 2.2.1 Meßstellen | 28 |
| 2.2.2 Gasproben | 29 |
| 2.2.3 Partikelproben | 30 |
| 2.3 Analysetechnik | 31 |
| 2.3.1 Temperaturmessung | 31 |
| 2.3.2 Gasanalyse | 31 |
| 2.3.3 Partikelanalyse | 31 |

| | | |
|---|--|-----------|
| 2.4 | Brennstoff | 33 |
| 2.4.1 | Holzhackschnitzel..... | 33 |
| 2.4.2 | Geometrische Einordnung Resthölzer | 34 |
| 2.5 | Versuchsbetrieb | 38 |
| 2.5.1 | Vergaser-Start..... | 38 |
| 2.5.2 | Versuchszeitraum | 40 |
| KAPITEL 3 - MATHEMATISCHE MODELLIERUNG..... | | 42 |
| 3.1 | Grundlegendes | 42 |
| 3.1.1 | Auswahl und Adaption des Basisprogrammes..... | 42 |
| 3.1.2 | Basis CFD | 49 |
| 3.1.3 | Einbindung des Unterprogrammes..... | 50 |
| 3.1.4 | Beschreibung des Unterprogrammes..... | 52 |
| 3.1.5 | Gittergenerierung | 56 |
| 3.1.6 | Festlegung der Randbedingungen | 57 |
| 3.2 | Physikalische Modelle..... | 58 |
| 3.2.1 | Wahl der geometrischen Parameter und der Strömungsart..... | 58 |
| 3.2.2 | Flechtströmung | 60 |
| 3.2.3 | Strömungswiderstand | 62 |
| 3.2.4 | Wärmeleitung | 63 |
| 3.2.5 | Wärmeübertragung | 64 |
| 3.2.6 | Weitere Gas-Stoffwerte..... | 65 |
| 3.3 | Chemische Reaktion | 66 |
| 3.3.1 | Modellübersicht | 66 |
| 3.3.2 | Grundlagen zur Reaktionskinetik | 67 |
| 3.3.3 | Berücksichtigung des Chemischen Gleichgewichtes | 72 |
| 3.3.4 | Verwendete Spezies, Reaktionen und Kinetikwerte..... | 75 |
| KAPITEL 4 - ERGEBNISSE UND DISKUSSION | | 82 |
| 4.1 | Entwicklung der Gaseigenschaften im Reaktor | 82 |
| 4.1.1 | Erläuterung der Darstellungsweise | 82 |
| 4.1.2 | Berechnete Strömungsgeschwindigkeit und Betrachtungen zum Strömungswiderstand | 82 |
| 4.1.3 | Entwicklung der Sauerstoffkonzentration | 84 |

| | | |
|--|---|------------|
| 4.1.4 | Temperaturverteilung und Diskussion des Wärmetransportes | 87 |
| 4.1.5 | Auftreten von Kohlenmonoxid | 93 |
| 4.1.6 | Verteilung von Wasserdampf im Reaktor..... | 94 |
| 4.1.7 | Konzentration von Wasserstoff | 96 |
| 4.1.8 | Entwicklung der Kohlendioxidkonzentration | 97 |
| 4.1.9 | Methanverteilung und Berechnungen zur Quervermischung | 98 |
| 4.1.10 | Verteilung und Krackung von Teer..... | 100 |
| 4.2 | Feststoff-Entwicklung | 102 |
| 4.2.1 | Wassergehalt | 103 |
| 4.2.2 | Flüchtigengehalt..... | 104 |
| 4.2.3 | Aschegehalt | 106 |
| 4.2.4 | Entwicklung der Partikelgröße..... | 107 |
| 4.3 | Rückschluß auf das Reaktionsverhalten im Vergaser | 108 |
| 4.4 | Vergleich mit der Literatur | 110 |
| 4.5 | Äußere Bilanzierung bei Variation des Wassergehaltes | 114 |
| KAPITEL 5 - ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK | | 120 |
| 6 | ANLAGEN | 125 |
| 7 | LITERATUR..... | 139 |

Abbildungsverzeichnis

| | Seite |
|---|-------|
| Abb. 1: Vergasung in Festbettreaktoren | 13 |
| Abb. 2: Leistungseinordnung einer Vergasungsanlage | 14 |
| Abb. 3: Schritte zur Mathematischen Modellierung | 19 |
| Abb. 4: Schematische Darstellung des Originalvergaser..... | 20 |
| Abb. 5: Blockschaltbild Vergasungsanlage TU Dresden | 23 |
| Abb. 6: Versuchsvergaser..... | 27 |
| Abb. 7: Meßstellen..... | 28 |
| Abb. 8: Gassonde | 29 |
| Abb. 9: Partikelsonde..... | 30 |
| Abb. 10: Brennstoff Holzhackschnitzel | 33 |
| Abb. 11: Summenkurve über der Partikellänge | 35 |
| Abb. 12: Summenkurve über der Partikelstärke | 36 |
| Abb. 13: Partikelspheritäten verschiedener Brennstoffe..... | 36 |
| Abb. 14: Schüttdichten verschiedener Brennstoffe..... | 37 |
| Abb. 15: Porositäten verschiedener Brennstoffschüttungen..... | 38 |
| Abb. 16: Brennkammertemperatur bei Zündung durch Luftvorwärmung..... | 39 |
| Abb. 17: Brennkammertemperatur bei Zündung durch Lötflamme in Analyseöffnung..... | 40 |
| Abb. 18: Beispielhafter Verlauf der Produktgaszusammensetzung..... | 41 |
| Abb. 19: Bilanz um ein Volumenelement..... | 49 |
| Abb. 20: Einbindung Unterprogramm in die Arbeitsweise des CFD- Basisprogrammes | 50 |
| Abb. 21: Funktionsübersicht des Unterprogrammes..... | 52 |
| Abb. 22: Struktogramm des Unterprogrammes | 53 |
| Abb. 23: Zwei Bilanzräume, Gas und Schüttung | 56 |
| Abb. 24: Schematisches Rechengitter mit Randbedingungen..... | 57 |
| Abb. 25: Modell zur Flechtströmung in einer durchströmten Schüttung | 60 |
| Abb. 26: Druckverlust einer Kugelschüttung über der Reynolds-Zahl | 62 |
| Abb. 27: Konvergenz des exponentiellen Anteils der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten über der Temperatur bei Variation der Aktivierungsenergie..... | 68 |

| | | |
|----------|--|-----|
| Abb. 28: | Geschwindigkeitskonstanten über der Temperatur bei exemplarischen Kinetikdaten..... | 69 |
| Abb. 29: | Arrheniusdiagramm für den Koksabbbrand..... | 70 |
| Abb. 30: | Zusammenfassung der Umsatzhemmung durch Reaktion und Transport..... | 71 |
| Abb. 31: | Vergleichbare Darstellung der Reaktionshemmung | 71 |
| Abb. 32: | Beispiele der Entwicklung von Gleichgewichtskonstanten | 73 |
| Abb. 33: | Produktzusammensetzung bei der Holzpyrolyse..... | 79 |
| Abb. 34: | Pyrolysevorgang des Holzes | 79 |
| Abb. 35: | Gasströmung..... | 83 |
| Abb. 36: | Variation Strömungswiderstand..... | 84 |
| Abb. 37: | Reaktionsrate Koksoxidation..... | 85 |
| Abb. 38: | Entwicklung Sauerstoffgehalt..... | 86 |
| Abb. 39: | Entwicklung Temperatur..... | 87 |
| Abb. 40: | Luftlanzen-Endstücke..... | 89 |
| Abb. 41: | Oxidationsbedingungen (Ausschnitt)..... | 90 |
| Abb. 42: | Auswirkung der Luftzahl auf Temperatur und Gaszusammensetzung (Brennstoff Koks)..... | 91 |
| Abb. 43: | Bedeutung der Wärmeleitung in der Schüttung | 92 |
| Abb. 44: | Entwicklung Kohlenmonoxid..... | 94 |
| Abb. 45: | Entwicklung Wasserdampf und Reaktionsrate der homogenen Wassergasreaktion..... | 95 |
| Abb. 46: | Entwicklung Wasserstoff | 96 |
| Abb. 47: | Entwicklung Kohlendioxid..... | 97 |
| Abb. 48: | Entwicklung Methan | 99 |
| Abb. 49: | Einfluß der Variation der dissipativen Quervermischung..... | 100 |
| Abb. 50: | Entwicklung Teer..... | 101 |
| Abb. 51: | Einfluß der Kinetikdaten auf die Teerkrackung | 102 |
| Abb. 52: | Gemessene und errechnete Entwicklung des Wassergehaltes | 103 |
| Abb. 53: | Gemessene Entwicklung des Flüchtigengehaltes und Anteil des berechneten unpyrolysierten trockenen Brennstoffes | 104 |
| Abb. 54: | Verweilzeit des Feststoffes bis Höhe Luftzufuhr..... | 105 |
| Abb. 55: | Gemessene Entwicklung des Aschegehaltes und berechneter Koksanteil..... | 106 |

| | | |
|----------|---|-----|
| Abb. 56: | Partikelgrößenverteilung in verschiedenen Reaktorhöhen | 107 |
| Abb. 57: | Postuliertes Reaktionsverhalten | 108 |
| Abb. 58: | Kurven gleichen Gehaltes an Flüchtigen bei einem Imbert-Generator | 111 |
| Abb. 59: | Verfahrensprinzip und Temperaturprofil im Reaktionsraum (Ausschnitt) des Zweizonenvergaser der TU Graz | 112 |
| Abb. 60: | Zonentemperaturen im Original-Vergaser nach Herstellerangaben und Modellierung | 113 |
| Abb. 61: | Verweilzeiten Feststoff/Gas bei Interpolation | 113 |
| Abb. 62: | Temperaturverlauf im Vergaser der Orginalanlage nach Zellenmodell bei Variation des Brennstoffwassergehaltes | 114 |
| Abb. 63: | Kohlenmonoxid und Kohlendioxid über Wassergehalt | 116 |
| Abb. 64: | Wasserstoff und Methan über Wassergehalt | 117 |
| Abb. 65: | Austrittstemperatur über Wassergehalt | 118 |
| Abb. 66: | Vergaserleistung über Wassergehalt | 119 |
| Abb. 67: | Luftzahl über Wassergehalt | 119 |

Tabellenverzeichnis

| | Seite |
|------------|---|
| Tabelle 1 | Komponenten der Vergasungsanlage..... 22 |
| Tabelle 2 | Regelgrößen der Vergasungsanlage..... 25 |
| Tabelle 3 | Übersicht der wichtigsten gespeicherten Prozeßdaten 25 |
| Tabelle 4 | Auslegungsleistung und innere Ausdehnung des Reaktors 26 |
| Tabelle 5 | Meßkomponenten des Gasanalysators..... 31 |
| Tabelle 6 | Partikelanalysen 32 |
| Tabelle 7 | Brennstoffanalyse 33 |
| Tabelle 8 | Vergleichsbrennstoffe 34 |
| Tabelle 9 | Versuchsbedingungen des Referenzversuches..... 41 |
| Tabelle 10 | Übersicht der hinzugefügten Modelle und Parameter 45 |
| Tabelle 11 | Rückgabefunktionen 54 |
| Tabelle 12 | Randbedingungen Brennstoffeintrag bei Varianten-Berechnungen.. 58 |
| Tabelle 13 | Parameter in der Modellierung 59 |
| Tabelle 14 | Übersicht zur Berechnungsweise der Reaktionen..... 66 |
| Tabelle 15 | Berücksichtigte Spezies 76 |
| Tabelle 16 | Berücksichtigte Reaktionen..... 76 |
| Tabelle 17 | Eigenschaften Modellholz und Modellteer..... 78 |
| Tabelle 18 | Pyrolyseprodukte nach Modell 79 |
| Tabelle 19 | Gewählte Kinetikdaten für Pyrolyse und Teerkrackung..... 80 |
| Tabelle 20 | Kinetikwerte zum Koksumsatz 81 |
| Tabelle 21 | Eckwerte zur Temperatur..... 89 |
| Tabelle 22 | Einordnung Brenngaszusammensetzung..... 115 |
| Tabelle 23 | Fortschritte und Einschränkungen in der Arbeit 121 |

Anlagenverzeichnis

| | Seite |
|----------|--|
| Anlage 1 | Partikelgeometrie von Vergleichsbrennstoffen 125 |
| Anlage 2 | Meßwerte der Partikelanalysen 126 |
| Anlage 3 | Ergebnisse zu den Gasprofilen 127 |
| Anlage 4 | Rechenergebnisse Brennstoffvariation 128 |
| Anlage 5 | Bilanzprüfungen zur Mathematischen Simulation mittels Tabellenkalkulation 129 |
| Anlage 6 | Bildschirmausdruck Basis- und Unterprogramm 131 |
| Anlage 7 | Rand- und Nebenbedingungen Fluent 132 |

Formelzeichen und Abkürzungen

| Zeichen | Bedeutung | Einheit |
|---------------|---|---|
| Re | Reynolds-Zahl | - |
| Pr | Prandl-Zahl | - |
| Pe | Peclet-Zahl | - |
| Nu | Nußelt-Zahl | - |
| Sh | Sherwood-Zahl | - |
| Φ_S | Spherität | - |
| ε | Porosität (Lückenanteil Schüttung) | - |
| V | Volumen | m^3 |
| X | Massenanteil | kg/kg |
| d_P | Partikeldurchmesser | m |
| l | charakteristische Abmessung | m |
| c | Geschwindigkeit | m/s |
| | Konzentration | mol/m^3 |
| ν | kinematische Viskosität | m^2/s |
| | Stöchiometriekoeffizient | - |
| η | dynamische Viskosität | $\text{kg}/(\text{m s})$ |
| c_p | spezifische Wärmekapazität | $\text{J}/(\text{kg K})$ |
| λ | Wärmeleitkoeffizient | $\text{W}/(\text{m K})$ |
| α | Wärmeübergangskoeffizient | $\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$ |
| ρ | Gasdichte | kg/m^3 |
| δ | Diffusionskoeffizient Gas | m^2/s |
| D | Diffusionskoeffizient der Schüttung | m^2/s |
| p | Druck | Pa |
| T | Temperatur | K |
| C_S | Strahlungskoeffizient des schwarzen Strahlers | $5,670 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)$ |
| x_{rad} | Strahlungslänge | m |
| a | spezifische Oberfläche | m^{-1} |
| M | Molare Masse | kg/mol |
| \bar{R} | allgemeine Gaskonstante | $8,3143 \text{ J}/(\text{mol K})$ |

| | | |
|-----------|------------------------------|-------------------------|
| t | Zeit | s |
| x_i | Volumenanteil der Spezies | - |
| \dot{r} | Reaktionsgeschwindigkeit | mol/(m ³ s) |
| | | kg/(m ³ s) |
| k | Geschwindigkeitskonstante | s ⁻¹ |
| | | kg/(m ² sPa) |
| k_0 | präexponentieller Faktor | s ⁻¹ |
| | | kg/(m ² sPa) |
| E_A | Aktivierungsenergie | J/mol |
| K | Gleichgewichtskonstante | - |
| H | Enthalpie | J/mol |
| S | Entropie | J/(mol K) |
| CFD | Computational Fluid Dynamics | |
| UDF | User Defined Function | |

1 EINFÜHRUNG

1.1 Vergasung

Im Sinne der vorliegenden Arbeit wird die Umwandlung eines festen zu einem gasförmigen Brennstoff durch understöchiometrische Oxidation mit Luft oder einem anderen Sauerstoffträger (z.B. Wasserdampf) als Vergasung bezeichnet.

Der Brennstoff durchläuft dabei prinzipiell die sich u.U. überlagernden Prozeßschritte

- Trocknung
- Pyrolyse
- Koksumsatz durch Oxidations- und Reduktionsreaktionen.

Trocknung

Bei Erwärmung des Holzes kommt es nach Sprengung der hygroskopischen Bindungen bei 98 ... 103 °C bis zur Temperatur von 150°C zur Entfernung von freiem und gebundenem Wasser.

Entgasung (Pyrolyse)

Schon während der Trocknung kommt es zu ersten Zersetzungen und der Produktion geringer Mengen an Essigsäure (CH_3COOH), Ameisensäure (HCOOH), Kohlenmonoxid (CO) und Kohlendioxid (CO_2). Bis zur Temperatur von 270°C treten vermehrt Reaktionswasser, Methylalkohol (z.B. CH_3OH), Essigsäure, CO und CO_2 auf. Ab 280°C steigt die Temperatur selbständig durch eine spontane exotherme Reaktion mit Freisetzung von bis zu 10% des Heizwertes auf 380°C an und setzt große Mengen an Gasen und Destillaten frei (CO , CO_2 , H_2 , Methan (CH_4), Essigsäure, Methanol (CH_3OH), Teer (hochsiedende Kohlenwasserstoffe)) /36/.

Die ausgetriebenen Produkte treten in großer Vielfalt auf. Dies ist ein bedeutendes Hemmnis bei der Entwicklung von Holzvergasern, denn für einen nicht genau definierbaren Stoff läßt sich nur schwierig ein geeigneter Prozeß entwerfen.

In der verbliebenen Holzkohle ist etwa die Hälfte der Brennstoffenthalpie gespeichert.

Es ist zu beachten, daß die Entgasung bei mäßigen Temperaturen insgesamt geringfügig exotherm verläuft.

Bereits bei 400°C kann eine teerfreie Holzkohle mit geringen Restmengen an Wasserstoff und Sauerstoff zurückbleiben. Das hohe Adsorptionsvermögen macht Holzkohle zu einem geeigneten Filter für die Reinigung von Gasen und Flüssigkeiten. Der massenspezifische Heizwert, im Mittel 30.000kJ/kg, liegt in der Größenordnung von Steinkohlen. Dieser hohe Wert wird allerdings durch die schlechtere Transporteffizienz, die der geringen Raumdichte von Holzkohle geschuldet ist, relativiert.

Die auskondensierenden Teere, Öle und Säuren waren lange Zeit wichtiger Rohstoff der Chemie. Ihr Gewichtsanteil nimmt mit steigender Temperatur und Verweilzeit durch Umsetzung zu niederen Verbindungen ab.

Oxidation und Reduktion

Bei Zugabe eines Sauerstofflieferanten und bei entsprechender Temperatur kommt es zum Umsatz der Pyrolyseprodukte. Oxidationen und Reduktionen beeinflussen sich gegenseitig aufgrund ihrer Energie- und Stoffbilanzen und bestimmen gemeinsam mit eventueller Wärmezufuhr oder -abfuhr die Gleichgewichtstemperatur und -zusammensetzung.

Innerhalb der Festbettvergaser, nur diese werden in der vorliegenden Arbeit betrachtet, unterscheidet man nach den relativen Strömungsrichtungen von Partikeln und dem ab- oder aufsteigenden Gas zwischen Gleich-, Gegen- oder Querstromvergasern (Abbildung 1) /6/.

Begründet durch den intensiven Wärmeaustausch ist die Unempfindlichkeit der Gegenstromvergasung gegenüber einem breiten Band von Brennstoffqualitäten hervorzuheben. Der Gleichstromvergaser hinterläßt im Brenngas geringere Mengen an unerwünschten Teeren, da die Gase heiße Vergasungszonen durchströmen. Mit dem Querströmer wird die Kombination der Vorteile von Gegen- und Gleichstromvergasern angestrebt /6/.

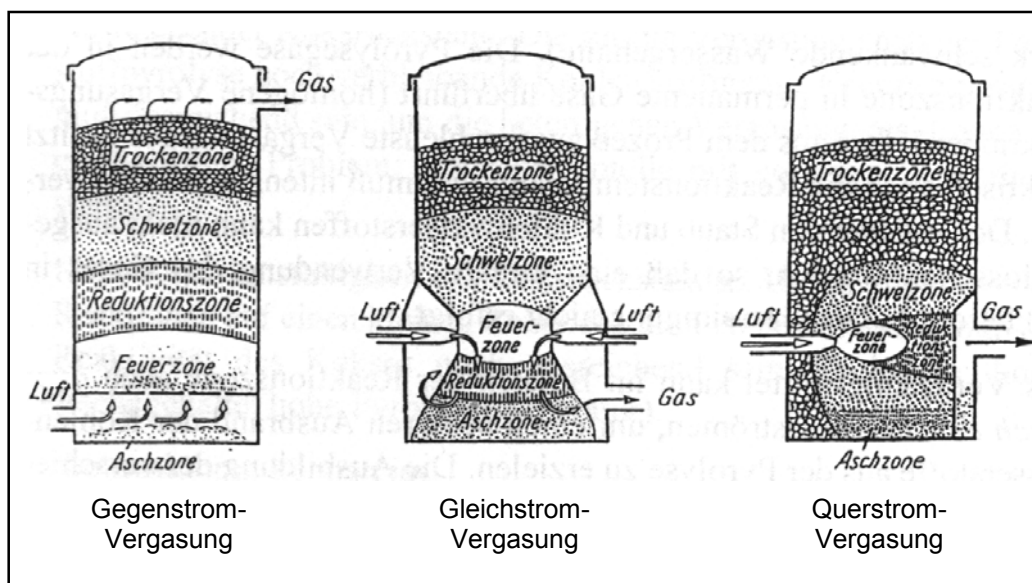


Abbildung 1 Vergasung in Festbettreaktoren

1.2 Motivation zur Vergasung im kleinen Leistungsbereich

Gegenüber den festen Ausgangsstoffen weist das mittels Vergasung produzierte Brenngas wesentliche Vorteile auf. Zu nennen sind neben der komfortablen Handhabbarkeit des gasförmigen Brennstoffes insbesondere die geschaffenen Möglichkeiten des Einsatzes in kompakten Elektroenergieerzeugungseinheiten wie Gasmotoren, Gasturbinen und zukünftig möglicherweise auch in Brennstoffzellen.

Damit bietet sich eine aussichtsreiche Alternative gegenüber der in kleinen Einheiten mit sehr hohen spezifischen Kosten verbundenen Kombination Verbrennung/Dampfkraftprozeß. Es herrscht die Erwartung, mit dieser Technologie regenerative Elektroenergie dezentral, effizient und kostengünstig zu erzeugen.

Als nachteilige Eigenschaft des erzeugten Brenngases gegenüber dem festen Primärbrennstoff sei die geringere volumenspezifische Brennstoffenthalpiedichte erwähnt. Daher ist das Produkt weder für größere Transportentfernungen noch zur saisonalen Speicherung geeignet.

Das sinnvolle Einsatzgebiet der Technologie in Bezug auf seine Leistungsgröße liegt damit unterhalb der bisher verbreiteten Elektroenergieerzeugungsanlagen, wie Abbildung 2 illustriert. Aufgrund der Nähe zum Verbraucher ist die Technologie für die Kraft-Wärme-Kopplung geeignet.

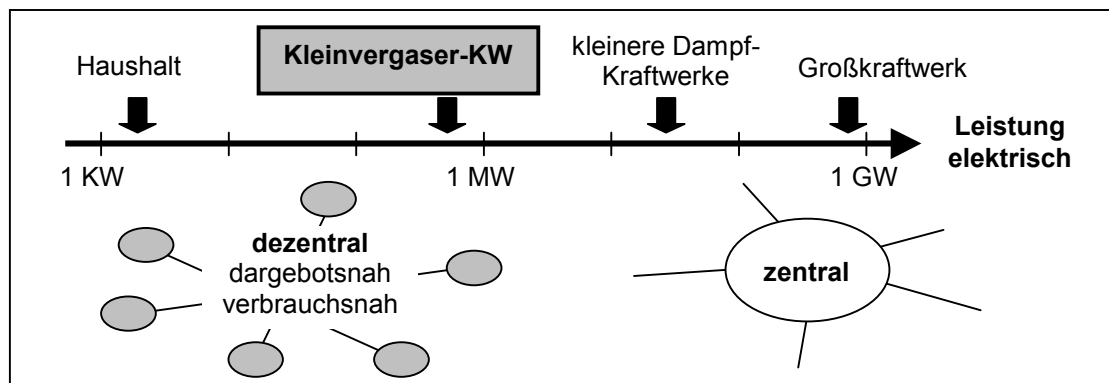


Abbildung 2 Leistungseinordnung einer Vergasungsanlage

Nach unten wird das Einsatzgebiet durch die steigenden spezifischen Investitions- und Betriebskosten begrenzt, nach oben dagegen aufgrund des zunehmenden Aufwandes zur Brennstoffbeschaffung. Dargebotsnah einsetzbare Energieumwandlungstechnologien vermeiden Brennstofftransporte über größere Entfernungen, wie sie beispielsweise für Steinkohle, Erdgas und -öl notwendig sind.

Die ökologische Motivation zur energetischen Nutzung von Biomasse, welche durch das anvisierte Umwandlungsverfahren gestärkt würde, liegt in der ausgeglichenen Bilanz gegenüber dem das Klima beeinflussenden Kohlendioxid (CO_2).

Durch verschiedene Rahmenbedingungen wie das Erneuerbare-Energien-Gesetz (EEG) und die Biomasseverordnung wird der politische Wille zum Einsatz der regenerativen Energiequelle Biomasse in Deutschland deutlich. Biomasse soll einen wesentlichen Beitrag zur Erreichung des Zieles der Europäischen Union und der Bundesrepublik Deutschland leisten, den Anteil Erneuerbarer Energien am gesamten Energieverbrauch bis zum Jahr 2010 zu verdoppeln /9/ (Inkrafttreten des EEG: April 2000).

Die energiewirtschaftliche Bedeutung von Biomassen liegt darin, daß diese Energieform gegenüber den stark fluktuierenden regenerativen Energiequellen Sonne und Wind in Angebot und Verwendung sowohl zeitlich als auch örtlich präzise planbar ist.

Unter der Voraussetzung, daß die Vergasungstechnologie preiswert, zuverlässig und mit einem hohem Gesamtwirkungsgrad eingesetzt werden kann, bietet die gesetzlich garantierte Einspeisevergütung für Elektroenergie aus Biomassen für Land-, Forst- und Kommunalwirtschaft ein neues dezentrales Wertschöpfungspotential im ländlichen Raum.

Ansporn ist aber auch die Herausforderung, zu dem über Jahrzehnte angestrebten und bisher nicht erreichten Durchbruch der Vergasungstechnologie für regenerative Einsatzstoffe im kleinen Leistungsbereich beizutragen.

1.3 Entwicklungsstand der Festbett-Vergasungstechnologie

Die Geschichte der Vergasung von Holz erlebte bisher mehrere Renaissance in Zeiten von Mangel oder Verteuerung anderer Brennstoffe, besonders während und nach dem zweiten Weltkrieg und kurzzeitig angeregt durch die Ölkrise der 70er Jahre des vorigen Jahrhunderts. Der bisherige stete Wechsel von Interesse und Desinteresse an der Holzvergasung verhinderte indes eine kontinuierliche Entwicklung, viele Erfahrungen gingen verloren.

Die Autarkiebestrebungen der DDR auf dem Gebiet der Gasversorgung schlugen sich in intensiven Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf dem Gebiet der Kohlevergasung nieder, welche zu großtechnischen Anlagen führten, die über Jahrzehnte ihre Zuverlässigkeit unter Beweis stellten. Nach der politischen Wende wurden die Verfahren, bspw. am Standort Schwarze Pumpe weiter genutzt und auf die Verarbeitung von Abfällen ausgebaut.

Für den kleineren Leistungsbereich ist aufgrund der angeführten Motivationsvielfalt derzeit eine Ära von Neu- und Weiterentwicklungen von Vergasungstechnologien zu verzeichnen. Unterstützt durch die Möglichkeiten moderner Meß-, Steuer- und Regeltechnik wird mit immer stärkerer Strukturierung (Aufteilung in Teilreaktoren), durch komplizierte Verschaltungen sowie mit der Entwicklung verschiedenster Arten von Gasreinigungsmethoden versucht, den hohen Ansprüchen des Prozesses gerecht zu werden. Problematisch ist insbesondere der während der Vergasung entstehende Teer. Dieser kondensiert in den nachgelagerten Verfahrensstufen und versetzt diese. Er verhindert den Einsatz von trockenen und bei Umgebungstemperatur arbeitenden Staubreinigungstechniken.

Eine Anzahl von Entwicklungen befindet sich derzeit mit ersten Demonstrationsanlagen in der Realisierungsphase. Dabei konnten bisher die positiven Ergebnisse der kleineren Technikumsanlagen jedoch nicht wiederholt werden. Der Nachweis eines erfolgreichen kommerziellen Dauerbetriebes steht nach wie vor aus.

Zitate aus einem aktuellen Bericht zum Stand der Biomassevergasung in Deutschland machen die Situation deutlich /47/:

„... Es besteht eine schreiende unbefriedigte Nachfrage ...

... Anlagen deutlich unterhalb 500 kW installierter elektrischer Leistung (sind) besonders gefragt ...

... Soweit es sich um Anlagen kleiner und mittlerer Leistung handelt, konnte bisher in keinem Falle die uneingeschränkte Marktfähigkeit erreicht werden ...“

Negative Erfahrungen machte auch eine sächsische Entsorgungsfirma. Der Versuch des Einsatzes eines Vergasers zur Verwertung kontaminierter Althölzer endete mit dem Konkurs des Herstellers, der das Vertragsziel eines zuverlässigen Betriebes der Anlage nicht erfüllen konnte.

Daraufhin wurde mit Partnern und unterstützt durch den Freistaat Sachsen ein Verbundprojekt zur Ertüchtigung des gescheiterten Verfahrens ins Leben gerufen, auf dem auch die vorliegende Arbeit basiert.

1.4 Stand der experimentellen Modellierung

Festbettvergaser kleinerer Leistung wurden bereits früh umfangreichen Untersuchungen unterworfen, z.B. 1937 bzgl. der Tauglichkeit für Motorfahrzeuge /56/. Dabei wurden verschiedene Prozeßparameter mit ihrem Einfluß auf die Vergasungsprodukte analysiert.

Die Erforschung des inneren Verhaltens hatte nur eine geringe Anzahl von Arbeiten zum Ziel, da dieses Vorhaben mit einem hohen Aufwand zur entsprechenden Ausstattung der Anlagen verbunden ist. Zwei dem Autor bekannten Beispiel seien hierzu genannt. Sie werden im Kapitel 4.4 zur Diskussion der Ergebnisse herangezogen.

In der vorgenannten Veröffentlichung /56/ wurden einem Imbert-Vergaser nach dessen Erkalten Partikelproben entnommen und auf ihren Flüchtigengehalt analysiert.

Von einer jüngeren Arbeit /26/, die jedoch noch nicht zur Veröffentlichung freigegeben wurde, sind Teilpublikationen bekannt, welche die vertikale Anordnung von 10 Temperaturmeßstellen im Reaktor zur diskreten Wertaufnahme in horizontaler Richtung beschreiben.

Es ist festzuhalten, daß das Erfordernis an mehrdimensionalen Messungen, neben der Temperatur auch zur Gaszusammensetzung und zur Partikelentwicklung, noch nicht befriedigend bearbeitet wurde.

1.5 Stand der mathematischen Modellierung

Nachfolgend wird der derzeitige Entwicklungsstand zur mathematischen Modellierung der Festbettvergasung umrissen. Eine stärker strukturierte Übersicht findet sich in /43/. Es soll zwischen der Bilanzierung des Gesamtprozesses und Arbeiten zu dessen Diskretisierung unterschieden werden.

Gesamtprozeß-Bilanzierung

Aufbauend auf ersten stöchiometrischen Betrachtungen und unter Zuhilfenahme von Berechnungsvorschriften zum chemischen Gleichgewicht wurden bereits 1937 /56/ und 1952 /23/ Voraussagen zur Produktgaszusammensetzung geleistet. Es wurde postuliert, daß sich noch im Vergasungsreaktor das Wassergasgleichgewicht einstellt. Seinerzeit wurden grafische Lösungsmethoden vorgeschlagen.

Der Einsatz von Personalcomputern und komfortablen Tabellenkalkulations- und Mathematikprogrammen mit den in ihnen implementierten Funktionen zur Matrizenrechnung ermöglichen inzwischen eine schnelle Berechnung von verschiedenen Varianten zur Nachbildung denkbarer Randbedingungen.

Über die Reaktions- und Strömungsmechanismen, deren Beeinflussung Inhalt einer anzustrebenden Optimierung ist, kann die Gesamtprozeß-Bilanzierung jedoch keine Informationen liefern.

Prozeß-Auflösung

Mit der Entwicklung der Rechentechnik wurde die Nutzung numerische Lösungsalgorithmen praktikabel, die eine, zunächst eindimensionale, Geometrieauflösung unter Berücksichtigung von Wärmetransportvorgängen und von endlichen Reaktionsgeschwindigkeiten ermöglichte /65/.

Die Berücksichtigung des Impulstransportes als dritte Bilanzierungsgröße ermöglichte dann den Übergang auf die mehrdimensionale Strömungssimulation.

Die Erhöhung der Anzahl der Bilanzräume durch deren Ausdehnungsminimierung schlägt sich in einer Reduzierung von Fehlern nieder, die auf eine zu grobe Diskretisierung zurückzuführen sind.

Derzeit ist eine intensive Entwicklungstätigkeit kommerzieller Anbieter von Strömungssimulationsprogrammen zu verzeichnen. Es bestehen noch Einschränkungen bezüglich der Implementierung von mehreren Phasen und von chemischen Reaktionen. Deshalb betreiben Forschungseinrichtungen nach wie vor Software-Eigenentwicklungen. Hierbei werden bspw. Zellenmodelle /18/ oder die Nutzung von finiten Differenzenverfahren /35/ forciert. Teilweise werden darüber hinaus zur genaueren Betrachtung der Partikelentwicklung im Prozeß partikelauflösende Modelle entwickelt /48/, /79/.

Es ist festzustellen, daß derzeit die Kombination zu einer mehrdimensionalen, mehrphasigen, partikelauflösenden und die Chemie berücksichtigende Simulation nach wie vor aussteht. Es sollte sich um eine kommerziell verfügbare Software, handeln, die dem Ingenieur als Werkzeug zur Nachbildung von Festbettreaktoren dienen kann.

1.6 Forschungsstand an der TU Dresden

Die Vorgehensweise zur Erforschung der Festbettvergasung an der TU Dresden, auf dessen Stand die vorliegende Arbeit aufbaut, wird im weiteren erläutert.

150 h-Versuche

Wie bereits erwähnt, war der unzuverlässige Betrieb einer kommerziellen Anlage Anlaß zu den Untersuchungen. Sie wird im folgenden als Originalanlage bezeichnet, da sie Vorbild zu den Modellbildungen war. Es handelte sich dabei um einen, in Abbildung 4 /37/ schematisch dargestellten, HTV-Juch-Vergaser mit einer Auslegungsleistung von 4 MW_{th} .

Die Anlage wurde zu Beginn der Untersuchungen in mehreren Dauerversuchen energetisch und stofflich bilanziert. Dabei wurde der Vergaser als Black-Box betrachtet /28/. Als wichtiges Ergebnis wurde der qualitativ diskontinuierliche Gasdurchsatz genannt. Des weiteren wichen die ermittelten Werte in wesentlichen Kriterien stark von den Projektdaten ab. So konnten nur etwa die Hälfte des

kalkulierten Durchsatzes sowie des angestrebten elektrischen Wirkungsgrades erreicht werden.

Diese unbefriedigenden Ergebnisse gaben Anlaß zur intensiveren theoretischen Beschäftigung.

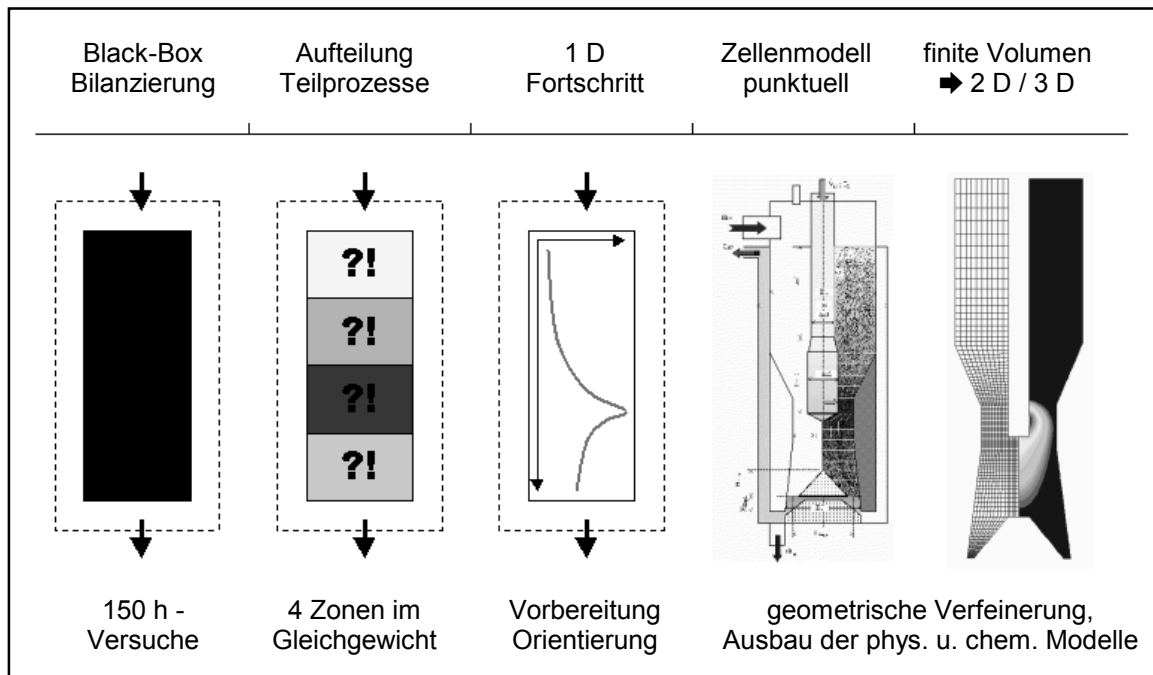


Abbildung 3 Schritte zur Mathematischen Modellierung

Einteilung nach Prozeßschritten

Im ersten Modellierungsschritt wurde eine Unterteilung des Reaktors in die Prozeßabschnitte Trocknung, Pyrolyse, Oxidation und Reduktion vorgenommen /24/. Anhand von Gleichgewichtsbetrachtungen konnten bereits Zwischenzustände bspw. von Temperaturen und Stoffumsätzen beschrieben und das entstehende Rohgas in seiner Zusammensetzung berechnet werden.

Bei der Gegenüberstellung von Ergebnissen mit den Angaben des Herstellers wurde deutlich, daß die konzipierten Maximaltemperaturen nicht in der gesamten Oxidationszone und damit nicht zum kompletten Umsatz unerwünschter Nebenprodukte zur Verfügung stehen.

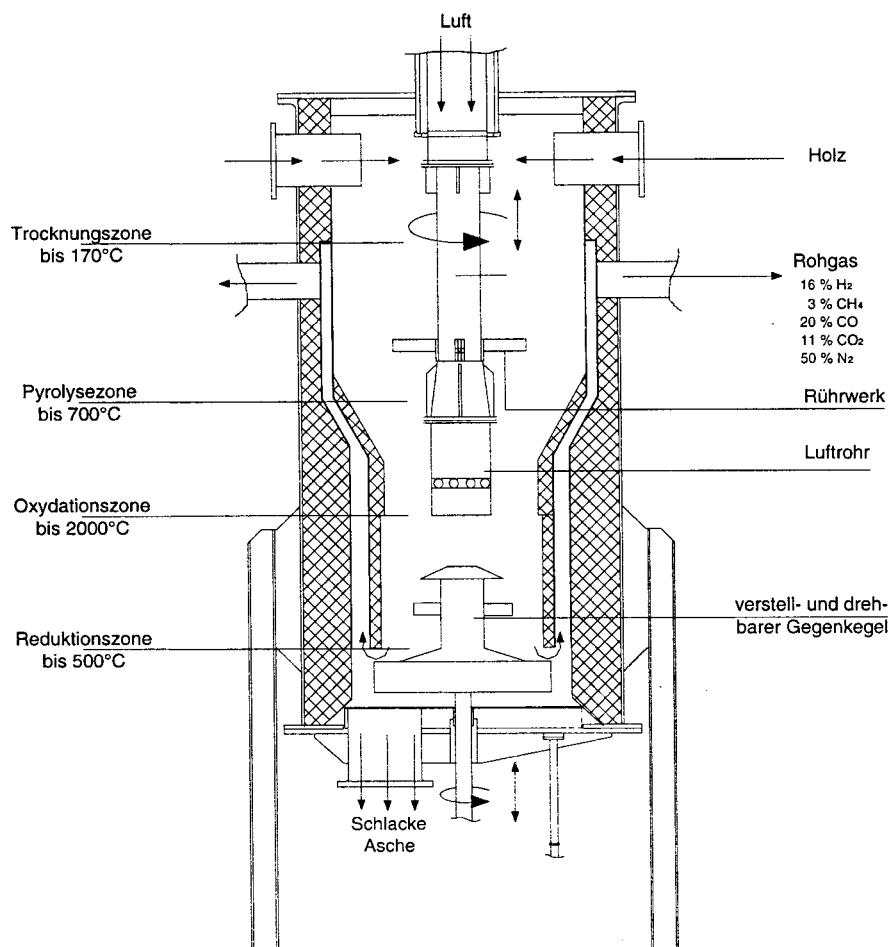


Abbildung 4 Schematische Darstellung des Orginalvergasers

Interpolation

Die Adaption der gewonnenen Stützstellen auf die Geometrie des Orginalvergasers, kombiniert mit einer linearen Interpolation, erbrachte mittels Tabellenkalkulation weitere quantitative Ergebnisse, wie z.B. die Größenordnung der zu erwartenden Verweilzeiten. Diese ist für den Umsatz der Stoffe von großer Bedeutung. Auch hier zeigten die Ergebnisse den Optimierungsbedarf des untersuchten Vergasers.

Zellenmodell

Ein Zellenmodell [4/, [19/ löste die Teilprozesse weiter auf. Die zweidimensionale Berechnung des Wärmetransportes, gekoppelt mit der eindimensionalen Stoffbilanzierung unter Nutzung der chemischen Kinetik, erbrachte Aussagen zu Orten erhöhter Reaktionsintensität sowie präzisierte Temperatur- und Speziesverläufe. Deutlich wurde die geringe Ausdehnung der Hochtemperaturzone.

Eine auch auf den Stofftransport ausgedehnte mehrdimensionale Simulation war eine weitere Zielstellung. Aufgrund der dazu notwendigen Impulsbilanzierung wurde der Weg der vollständigen Eigenentwicklung des Programms verlassen und statt dessen auf die Nutzung und Anpassung kommerzieller Software übergegangen. Dies war u.a. Inhalt der vorliegenden Arbeit. Mittels finiter Bilanzräume konnte eine hoch aufgelöste Modellierung realisiert werden.

1.7 Inhalt der Arbeit

Ziel der vorliegenden Arbeit war es, mittels experimenteller und mathematischer Modellierung der chemisch-physikalischen Vorgänge am Beispiel des Brennstoffes Holzhackschnitzel die Transparenz des Prozesses der Festbettvergasung als Grundlage zur Verbesserung der Technologie zu erarbeiten. Der Vergleich von Experiment und Simulation bot dabei die Chance zur gegenseitigen Validierung und Ergänzung.

Im **Experiment** wurden an einem Modell-Gleichstromvergaser mit einer thermischen Leistung von $75 \text{ kW}_{\text{th}}$ Untersuchungen durchgeführt. Durch die umfangreichen Meßmöglichkeiten wurden in mehreren Höhen radiale Profile der interessierenden Größen wie Temperatur, Trocknungs-, Pyrolyse- und Abbrandfortschritt der Partikel sowie die Gaszusammensetzung aufgenommen.

Parallel erfolgte die **mathematische Modellierung** des Modellvergasers mittels eines Simulationsprogrammes. Für die Belange der Festbettvergasung war das kommerzielle Basis-Programm durch die Entwicklung von Unterprogrammen zur Nachbildung der Wechselwirkungen zwischen Schüttung und Gasphase zu ergänzen. Die Reaktorgeometrie wurde zweidimensional unter Ausnutzung der Rotationssymmetrie in einzelne Zellen diskretisiert. Numerisch wurden dann die Strömungsfelder, Reaktionen, Temperaturen usw. berechnet. Es sollte ein Simulationswerkzeug erarbeitet werden, welches im Stande ist, den Prozeß nachzubilden und das vom fachkundigen Leser nachempfunden und angewendet werden kann.

2 EXPERIMENT

2.1 Vergasungsanlage

2.1.1 Anlagenbeschreibung

Aufgabe der Versuchsanlage für die vorliegende Arbeit war die Sicherstellung eines störungsfreien Betriebes der zu untersuchenden Kernkomponente Vergaser. Aus diesem Grund wurden die peripheren Anlagenteile so weit wie möglich vereinfacht. So wurde auf eine Verstromung des gewonnenen Brenngases in einem Motor verzichtet, sondern dieses durch Verbrennung entsorgt. Trotzdem waren die Versuche problembehaftet. So stellte die Verbrennung des Produktgases besondere Ansprüche an die Brennersteuerung, da sich die Betriebsbedingungen der Brennkammer in kurzen Zeiträumen wesentlich änderten. Ursachen waren Schwankungen in Druck und Heizwert des Brenngases sowie in dessen Massenstrom. Dies machte in kurzen Zeiträumen wiederholte Nachregelungen der Druckbedingungen nötig.

Die wesentlichen Teile der Versuchsanlage gibt Tabelle 1 wieder. Ihr Zusammenwirken wird anhand Abbildung 5 erläutert.

Tabelle 1 Komponenten der Vergasungsanlage

| | Teile |
|-----------------|---|
| Luftzufuhr | Vergasungsluftgebläse Luftvorwärmer Regelklappe |
| Vergaser | Brennstoffzufuhr Reaktor Ascheaustrag |
| Brenngasstrecke | Verbrennungsluftgebläse Brennkammer mit Erdgas- Zusatzflamme Rauchgaskühler Saugzug geregelt Schornstein |

Mittel eines Verdichters wird dem Vergaser, geregelt über ein Drosselklappe, die festgelegte Menge an Vergasungsluft zugeführt. Dies ist die primäre Regelgröße.

Entsprechend des Signals eines Füllstandsmelders im Inneren des Reaktors geschieht die diskontinuierliche Brennstoffzufuhr mit einem Volumen von jeweils 10 l. Dieser Wert ist durch das Zwischenvolumen des Doppelschieber-Schleusensystems vorgegeben.

Eine Schnecke fördert das Material in den Reaktionsraum. Dadurch erfolgt eine Verzögerung und Vergleichmäßigung des Eintrages. Eine diskontinuierliche Befüllung ist technisch einfacher zu realisieren, sie ist jedoch mit einem instationären Einfluß auf den Prozeß verbunden, was sich in der zeitlichen Entwicklung der Produkteigenschaften auswirkt.

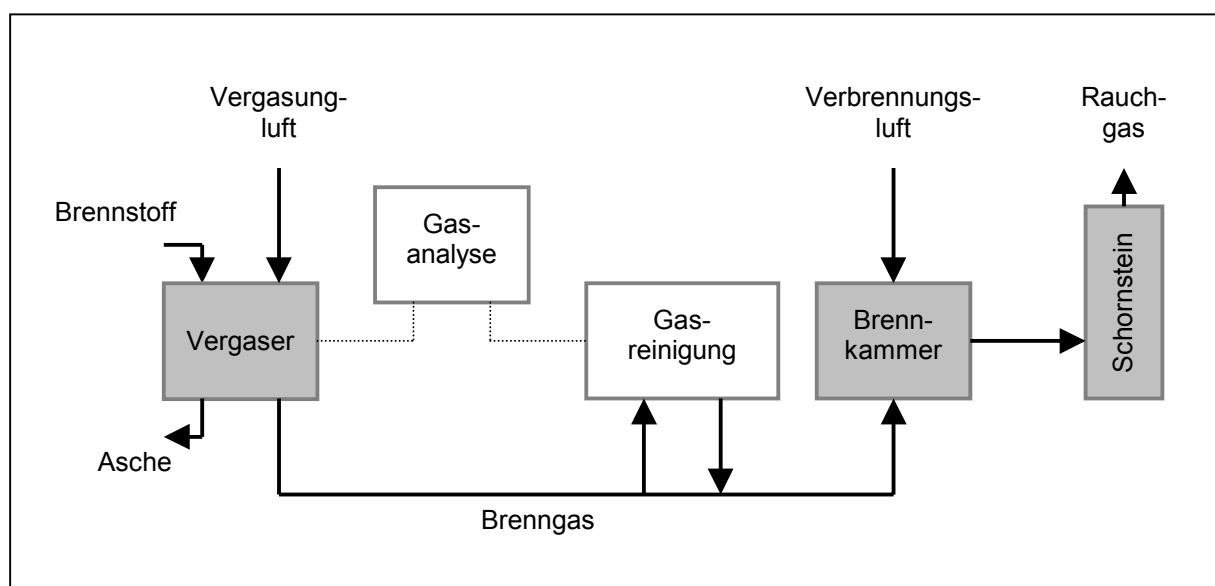


Abbildung 5 Blockschaltbild Vergasungsanlage TU Dresden

Der Ascheaustrag erfolgt durch Rotation eines Gegenkegels am Boden des Vergasers, welcher im Kapitel 2.1.3 näher erläutert wird. Ein Maß für den Abbrand der Partikel und damit für die Notwendigkeit des Ascheaustrages ist der Druckverlust über der Schüttung. Dieser steigt mit sich verringernder Partikelgröße und kann daher zur Feststellung des Prozeßfortschrittes herangezogen werden. Alternative Indikatoren wären Produktgas- oder Aschezusammensetzung. Durch die Drehung des Kegels kommt die Schüttung im Spalt zwischen diesem und der Wand in Bewegung und fällt in den Ascheaustrag.

Das erzeugte Brenngas wird einer Brennkammer zugeführt. Sie ist, insbesondere zur Vorwärmung, mit einem Erdgas-Zusatzbrenner ausgerüstet. Dieser ist im regulären Vergaserbetrieb, bei dem die Brenngasqualität die Temperaturen in der Brennkammer aufrechterhalten kann, außer Funktion. Durch Zufuhr von

Verbrennungsluft erfolgt hier bei Temperaturen von etwa 1000 °C die sichere Autoxidation der brennbaren Komponenten vor Abgabe der Rauchgase an die Umwelt. Geregelt und sichergestellt wird dies über die Kontrolle des Restsauerstoffgehaltes im Rauchgas.

Um das Abgas schließlich mittels eines Saugzuges über den Kamin abführen zu können, ist dessen Kühlung notwendig. Dabei fällt eine erhebliche Menge Kondensat an, welches aus der Leitung abgeführt werden muß. Der Saugzug wirkt auf den Druck im Inneren des Vergasers zurück. Es kann daher ein Unterdruck sichergestellt werden, der ein unkontrolliertes Ausströmen von z.T. giftigen und explosiven Brenngasen in den Versuchsraum verhindert.

Sowohl das Produktgas am Austritt des Vergasers als auch Proben von verschiedenen Gasentnahmen aus dessen Inneren können der vorhandene Gasanalyse zugeführt werden.

An einem Bypass der Brenngasstrecke sind Anschlüsse für weitere Untersuchungen vorgesehen. Vorstellbar sind verschiedene Arten der Brenngasnutzung. Des weiteren werden in parallelen Arbeiten /34/ Gasreinigungstechnologien erforscht. Dabei handelt es sich speziell um die Verfahren der katalytischen und nichtkatalytischen partiellen Oxidation der im Brenngas enthaltenen Teere.

Da die Bildung eines explosiven Gasgemisches aus Brenngas und Luft nicht auszuschließen ist, wurde die Anlage zur Sicherheit mit einer Druckentlastung über eine Wasservorlage geschützt. Über diese erfolgt im Falle von Verpuffungen die kontrollierte Ableitung der mechanischen Energie.

Eine Entstaubung des Brenngases ist nicht vorhanden. Für eventuell mitgerissene Partikel kann von einem vollständigen Umsatz in der Brennkammer ausgegangen werden. Es kam zu keiner Störung des Betriebes aufgrund von Ascheablagerungen in den Ableitungen.

2.1.2 Steuerung und Regelung

Die Steuerung basiert auf der SPS SIMATIC S7-300. Die Bedienung erfolgt über einen über PROFIBUS gekoppelten PC. Auf ihm können über eine grafische Benutzeroberfläche (ProTool/Pro V 5.2) die wesentlichen Vorgaben (Ein- und

Austrag, Drehzahlen, Zielwerte für Drücke usw.) definiert werden. Die in Tabelle 2 aufgeführten Regelkreise waren herstellerseitig einprogrammiert:

Tabelle 2 Regelgrößen der Vergasungsanlage

| | Überprüfung | Stellglied |
|---------------------------------|--------------------|-----------------------|
| Vergasungsluftmenge | Volumenstrommesser | Drosselklappe |
| Vergasungslufttemperatur | Temperaturmessung | Luftherhitzer |
| Vergaserdruck | Druckmessung | Saugzug Rauchgas |
| O ₂ -Gehalt Rauchgas | Sauerstoffmessung | Verbrennungsluftmenge |
| Temperatur Rauchgas | Temperaturmessung | Bypass Kühlwasser |

Die Regelkreise für die Vergasungsluftmenge und den Brenngasdruck konnten einen zuverlässigen Betrieb nicht sicherstellen. Durch Handfeststellung der entsprechenden Stellglieder konnten diese ohne Nachteile auf den Prozeß ersetzt werden. Die Regelung des Sauerstoffgehaltes im Rauchgas wurde beibehalten. Die Luftvorwärmung war während der Versuche außer Betrieb.

Mittels PC ist eine komfortable Werteingabe und die Meßwertvisualisierung am Arbeitsplatz des Anlagenfahrers gegeben.

Tabelle 3 Übersicht der wichtigsten gespeicherten Prozeßdaten

| | Anzahl | Beispiele |
|------------------------|--------|---|
| Temperaturen [°C] | 14 | - Innenwand Vergaser - Luft, Brenngas - Brennkammer |
| Gaskomponente [Vol.-%] | 6 | - Brenngas - Rauchgas |
| Druck | 3 | - Vergaser |
| Durchfluß | 3 | - Gasströme |

Die Speicherung erfolgte für insgesamt 35 Meßwerte (Tabelle 3) im Intervall von 30 Sekunden. Mittels der Tabellenkalkulation EXCEL erfolgte dann die Formatierung der Rohdaten sowie deren Auswertung.

2.1.3 Reaktor

Der Versuchsreaktor wurde in seiner Grundgeometrie an den Originalvergaser, welcher dem vorangestellten Forschungsprojekt zugrunde lag, angelehnt. Gemessen an der dort realisierten Feuerungsleistung lag das Verkleinerungsverhältnis bei 1 : 23.

Unter der Voraussetzung einer gleichen volumenspezifischen Belastung und unter Berücksichtigung einer der Brennstoffgröße Rechnung tragenden Mindestausdehnung ergab sich ein geometrischer Maßstab von 1 : 2,8.

Die wichtigsten Parameter sind in Tabelle 4 zusammengefaßt.

Tabelle 4 Auslegungsleistung und innere Ausdehnung des Reaktors

| | Wert | Einheit |
|--------------------------------------|----------|------------------|
| thermische Leistung | 75 | kW _{th} |
| Betthöhe | ca. 1200 | mm |
| Bettdurchmesser | | |
| minimal | 350 | mm |
| maximal | 592 | mm |
| Höhe Lufteintritt über Brenngasabzug | ca. 600 | mm |

Abbildung 6 gibt im Bild und in der schematischen Darstellung lt. Konstruktionsunterlagen einen Eindruck über den Aufbau und soll im weiteren zur Erläuterung der Wirkungsweise herangezogen werden.

Der Vergaser besteht aus mehreren Schüssen. Die unteren beiden umschließen dabei die eigentliche Reaktionszone. Sie wurden zur Isolierung und aufgrund der zu erwartenden sehr hohen Temperaturen mit einer keramischen Ausmauerung versehen. In einer Einschnürung führt diese den Brennstoff durch eine eng gehaltene Hochtemperaturzone, der eine sich aufweitende Nachreaktionszone folgt.

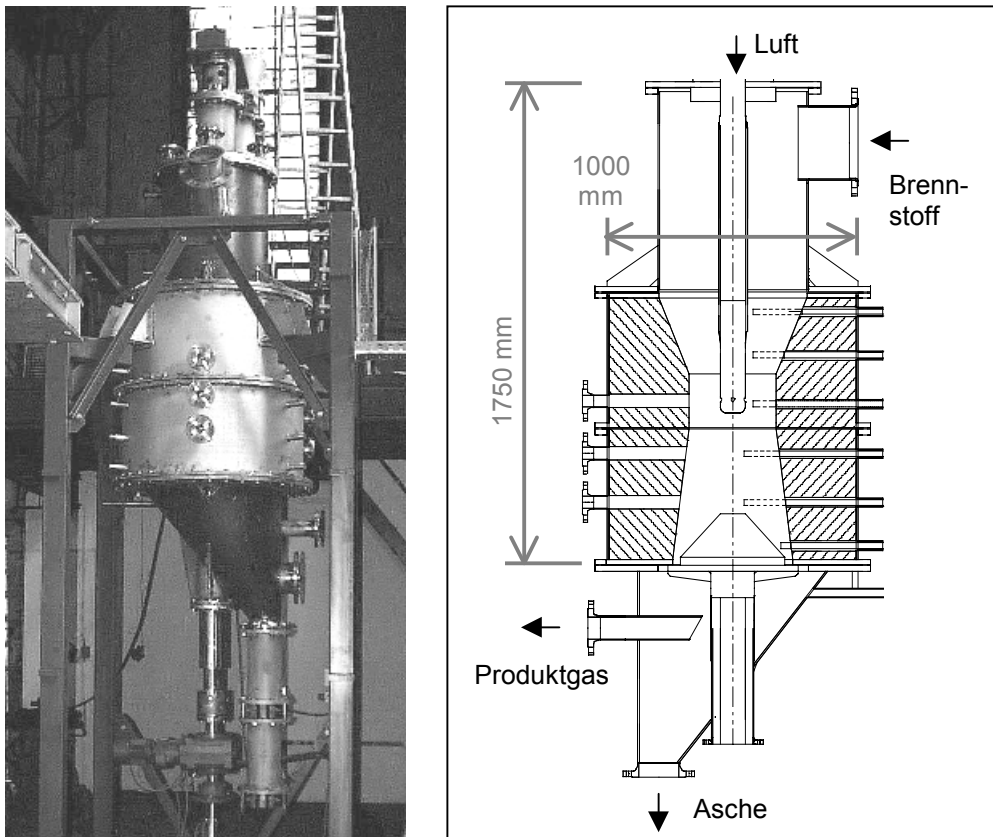


Abbildung 6 Versuchsvergaser

Die Schüttung wird, wie erwähnt, nicht durch einen konventionellen Rost, sondern von einem Drehkegel gehalten, der einen einstellbaren Spalt zur Reaktorwand realisiert. Der Kegel ist vertikal und durch Drehung beweglich und bietet damit Einstellmöglichkeiten für einen optimalen Halt der Schüttung und einen bedarfsgerechten Ascheaustrag.

Die zentrale Luftlanze ist mit in der Grafik nicht wiedergegebenen Rührelementen ausgerüstet. Durch Drehung soll eine Entstehung von Brennstoffbrücken verhindert bzw. sollen solche zerstört werden. Jedoch wurde diese Funktion nicht hinreichend erfüllt. Trotz Drehen bewegte sich der Brennstoff nicht wie gewünscht. Aus diesem Grund mußte ein weiteres Rüttелеlement an der Wandseite nachgerüstet werden.

Sowohl die Brennstoff- als auch die Luftbeaufschlagung geschehen von oben herab und das Brenngas sowie die Asche werden am Boden abgezogen. Somit handelt es sich bei dem vorliegenden Reaktor um einen absteigenden Gleichstromvergaser. Da das Mundstück der Luftlanze das Vergasungsmittel weit in die Oxidationszone einleitet, sind auch Elemente eines Querströmers vorhanden.

Infolge des damit einher gehenden stark ausgeprägten zweidimensionalen Strömungsverhaltens ist dieser Reaktor zur Untersuchung der wesentlichen Charakteristika eines Festbettvergaser, und damit zur Realisierung der Ziele der vorliegenden Arbeit, geeignet.

2.2 Probenahme

2.2.1 Meßstellen

Der Modellvergaser der TU Dresden ist durch die Bestückung mit einer Reihe von Öffnungen für die Entnahme von Proben ausgerüstet (Abbildung 7).

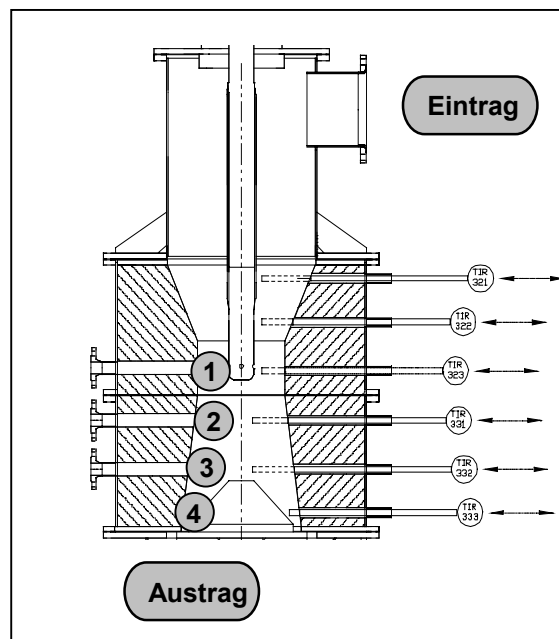


Abbildung 7 Meßstellen

In sechs Höhen befinden sich, über dem Umfang gleichmäßig verteilt, jeweils drei kleinere Öffnungen mit einem konstruktiv vorgesehenen Durchmesser von 30 mm. Aufgrund der Rotationssymmetrie wurde jeweils nur eine genutzt. Zudem waren die zeitlichen Schwankungen an einer Entnahmestelle pro Meßebeine so stark, daß ein Vergleich über den Umfang nicht sinnvoll war. Aufgrund von Versatz durch Fertigungsungenauigkeiten der feuerfesten Ausmauerung war effektiv nur ein Bohrungsdurchmesser von 6 mm nutzbar. Hier wurden Gasentnahmen und Temperaturmessungen vorgenommen.

Im oberen Teil des Vergasers mußten zur Sicherstellung des Materialflusses nachträglich Rüttелеlemente eingebracht werden, die eine Probennahme

verhinderten. Daher konnten nur die unteren vier Meßebenen (1 bis 4 in der Abbildung) genutzt werden. In diesen wurden jeweils in einer gleichmäßigen radialen Aufteilung von der inneren Wand zur Mittelachse vier Stützstellen festgelegt. Damit ergab sich ein zweidimensionales Raster von 16 Meßstellen für die zur Beschreibung des Prozeßfortschrittes wichtigen Kenngrößen Temperatur und Konzentration der wichtigsten Gasspezies.

Des weiteren befanden sich im unteren Teil in drei Ebenen Öffnungen mit einem Durchmesser von 42 mm von denen, ebenfalls aufgrund von Fertigungsungenauigkeiten, effektiv nur 25 mm zur Verfügung standen. Diese Öffnungen wurden zum Bergen von Partikelproben genutzt. Aufgrund des ungünstigen Verhältnisses zwischen Probengröße und Reaktorquerschnitt war hierbei nur eine Gesamtprobe pro Ebene möglich. In Verbindung mit Aussagen aus Analysen der äußeren Meßstellen am Eintrag (Brennstoff) und am Austrag (Aschekasten) ergaben sich damit für die Partikeluntersuchung eindimensional fünf Stützstellen.

2.2.2 Gasproben

Die Entnahme der Gasproben aus dem hauptsächlich interessierenden unteren Oxidations- und Reduktionsteil erfolgte durch ein Absaugsonde, welche in Abbildung 8 dargestellt ist.

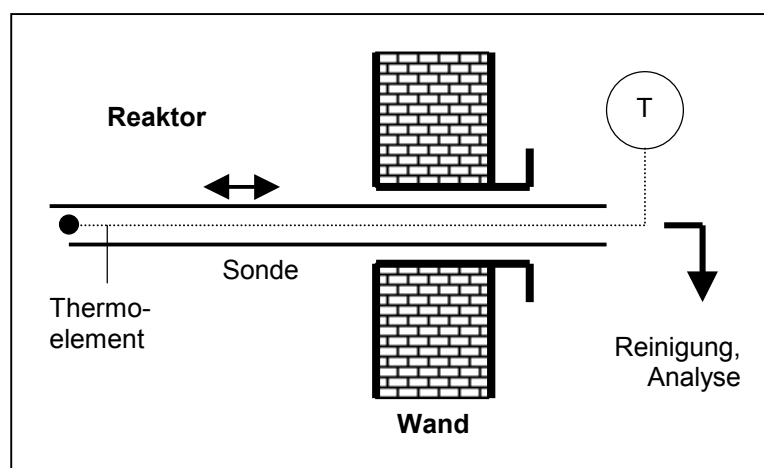


Abbildung 8 Gassonde

An der Spitze der Sonde, und damit direkt am Entnahmeort, befand sich der Meßkopf des Thermoelementes. Die Zuleitung des Mantelthermoelementes wurde in der Sonde verlegt und dem Auswertegerät zugeführt.

Die Abdichtung gegenüber dem Reaktor erfolgte durch Stopfpackungen zwischen Sonde und Reaktor, welche zur Lageverschiebung der Sonde (Meßstellenwechsel) kurzzeitig gelöst wurde.

Eine schnelle Abkühlung und das Auskondensieren von Wasser und höheren Kohlenwasserstoffen wurde durch Quentschen in einer im Eisbad gekühlten Waschflasche erreicht. Einer chemischen Nachtrocknung an Kalziumchlorid folgte die Zuleitung zum Analysenschrank.

Für die 16 Meßstellen des festgelegten Rasters wurden 10 Meßreihen durchgeführt und ausgewertet.

2.2.3 Partikelproben

Die Partikelentnahme erfolgte in 7 Meßreihen mit einem Bergungsrohr gemäß Abbildung 9.

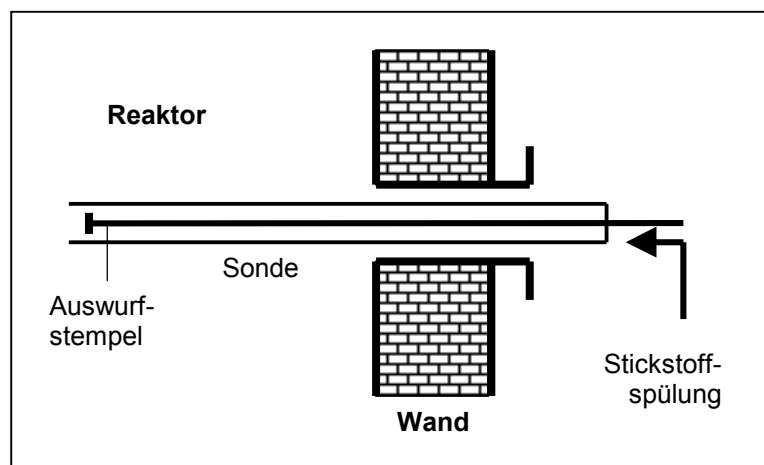


Abbildung 9 Partikelsonde

Die Sonde ist an ihrem Kopf mit einer spitz zulaufenden Fase ausgeführt, um leicht in die Schüttung eindringen zu können und somit Partikel aus dem gesamten Radius zu erreichen. Um eine Nachreaktion der glühenden Partikel zu verhindern, wurde die Sonde bis zum Erkalten der Probe mit Stickstoff gespült. Erst danach erfolgt deren Bergung.

2.3 Analysentechnik

2.3.1 Temperaturmessung

Zur Messung der Temperatur im Inneren des Reaktors wurde ein NiCr-Ni-Thermoelement (Typ K) verwendet. Dieses Thermopaar wird für einen Meßbereich von $-200\text{ }^{\circ}\text{C}$ bis $1370\text{ }^{\circ}\text{C}$ eingesetzt. Gemessene Werte oberhalb der Grenztemperatur sind daher nur bedingt verwendbar.

Der Querschnitt des verwendeten Mantelthermoelementes von 1 mm resultierte in einer sehr kurzen Ansprechzeit.

Das Speichern der Meßwerte erfolgte in einem Intervall von 15 Sekunden.

Für Einzelmessungen in der Hochtemperaturzone stand darüber hinaus ein Thermopaar PtRh30%-PtRh6% (Typ B) mit einem keramischen Schutzrohr zur Verfügung. Der Meßbereich beträgt hierbei $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ bis $1800\text{ }^{\circ}\text{C}$.

2.3.2 Gasanalyse

Zur Ermittlung der Gaszusammensetzung wurden die in Tabelle 5 aufgeführten Analysatoren der Fa. Fisher-Rosemount eingesetzt. Ihre Zuverlässigkeit wurde durch regelmäßigen Null- und Kalibriergasabgleich überprüft.

Tabelle 5 Meßkomponenten des Gasanalysators

| | Meßbereich Analyse Vol.-% | Bereich Speicherung Vol.-% |
|--------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|
| O ₂ - Sauerstoff | 0-25 | 0-25 |
| CO - Kohlenmonoxid | 0-66 | 0-30 |
| CO ₂ - Kohlendioxid | 0-55 | 0-30 |
| H ₂ - Wasserstoff | 0-50 | 0-30 |
| CH ₄ - Methan | 0-55 | 0-30 |

2.3.3 Partikelanalyse

Die Ergebnisse der Analysen in Tabelle 6 wurden zur Untersuchung des Partikelreaktionsfortschrittes herangezogen. Sie wurden vom Kraftwerks-Chemischen Labor des Institutes durchgeführt.

Tabelle 6 Partikelanalysen

| | Parameter | Methodik |
|---|----------------------|------------|
| (1) - alle Proben | Wassergehalt | DIN 51 718 |
| | Flüchtigengehalt | DIN 51 720 |
| | Aschegehalt | DIN 51 719 |
| (2) - nur Ausgangsstoff (Eintrag) | C - Kohlenstoff | DIN 51 721 |
| | H - Wasserstoff | DIN 51 721 |
| | O - Sauerstoff | DIN 51 721 |
| | Heizwert | DIN 51 900 |
| (3) - aus Reaktorinnerem und Asche (Austrag) | Korngrößenverteilung | DIN 51 704 |

(1) Die erstgenannten drei Analysen wurden ausgewählt, da sie Rückschlüsse auf die Reaktionsfortschritte von Trocknung, Pyrolyse und Koksabbbrand zulassen. Daher wurden sie für alle Proben angewendet.

Zur Ermittlung des Wassergehaltes wird die Probe mit einer Einwaage von ca. 5 g bei 105 °C bis zur Gewichtskonstanz gehalten und der Massenverlust bestimmt. Der Anteil der flüchtigen Bestandteile wird dadurch ermittelt, daß die Probe exakt 7 min einer Temperatur von 900 °C ausgesetzt wird. Die spezielle Form der Probebehälter stellt dabei sicher, daß durch die entweichenden Gase eine Schutzatmosphäre gebildet wird und es zu keiner Reaktion mit Luftsauerstoff kommen kann. Die Veraschung geschieht hingegen unter Luftatmosphäre bei 800 °C.

(2) Die Elementaranalysen sowie die Bestimmung des Heizwertes des Ausgangsstoffes liefern die grundlegenden Randbedingungen für die stofflichen und energetischen Bilanzen in der mathematischen Modellierung.

(3) Für einen Teil der aus dem Inneren des Reaktors und aus der Asche geborgenen Partikelproben wurden des weiteren Siebkennlinien aufgenommen. Mit den Ergebnissen wurden die für die mathematische Modellierung getroffenen geometrischen Annahmen überprüft.

2.4 Brennstoff

2.4.1 Holzhackschnitzel

Beim verwendeten Brennstoff Holzhackschnitzel, handelte es sich um Sägewerksabfälle (Abbildung 10).



Abbildung 10 Brennstoff Holzhackschnitzel

Das Laborergebnis einer Analyse von vorgetrocknetem Brennstoff zeigt Tabelle 7 (/77/). Für die Versuche wurde der Wassergehalt nach Bedarf eingestellt.

Tabelle 7 Brennstoffanalyse

| | Ma.-%, roh |
|-----------------------|---------------|
| Wassergehalt | 20,0 |
| Aschegehalt | 0,33 |
| Kohlenstoff - C | 41,2 |
| Wasserstoff - H | 4,8 |
| Stickstoff - N | 0,18 |
| Schwefel - S | 0,05 |
| Sauerstoff (Rest) - O | 36,3 |




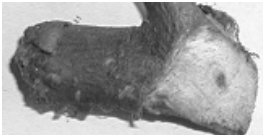

Die Probe wies einen Heizwert von 14,7 MJ/kg auf. Beachtenswert ist der geringe Asche-, Stickstoff- und Schwefelgehalt des naturbelassenen Holzes. Der Anteil der

flüchtigen Bestandteile wurde bei einer parallelen Analyse mit 70,3 Ma.-%_{roh} ermittelt.

2.4.2 Geometrische Einordnung Resthölzer

Zur Einordnung werden in Tabelle 8 dem im Versuch verwendeten Brennstoff ein Band von Vergleichsbrennstoffen gegenübergestellt, welches im wesentlichen die für die untersuchte Technologie in Frage kommenden Ausgangsstoffe abdeckt. Dies betrifft holzartige Biomasse, welche nach der Aufbereitung eine gut durchströmbare Schüttung gewährleistet. Es handelte sich um zwei Kategorien Schreddermaterial, Holzhackschnitzel aus Straßenrandverschnitt sowie um Pellet mit einem Durchmesser von 12 mm.

Tabelle 8 Vergleichsbrennstoffe

| | Herkunft | Art | Zerkleinerung |
|--|-----------------------------|----------------------------|------------------------------------|
| Abbruch (grob)  | Originalanlage Espenhain | behandelt | Bauabbruch, grob gebrochen |
| Abbruch (mittel)  | Verwerter Dresden | behandelt | Bauabbruch, mittel gebrochen |
| HHS (Versuchsbrennstoff)  | Sägewerk Zwönitz | natur- belassen | gehackt |
| HHS  | Verschnitt Adorf | natur- belassen | gehackt |
| Pellet  | über VER | mit Bindemittel | Sägemehl pelletiert |

Resthölzer werden im wesentlichen auf zwei Zerkleinerungsarten für die thermische Verwertung aufgearbeitet, durch Hacken oder Brechen (Schreddern).

Während im ersten Fall mittels einer Schneide die Holzfaser durchtrennt wird, zersplittert diese im zweiten Fall aufgrund mechanischer Biegeüberbelastung. Die Hackung ist auf sauberes Ausgangsmaterial ohne Störstoffe angewiesen. Bauabbruchhölzer müssen daher grundsätzlich gebrochen werden.

Mittels der Pelletierung kann ein sonst in einer Festbettvergasung nicht nutzbarer Brennstoff wie Sägemehl durch Pressung, evtl. unter Zusatz von Bindemitteln, in eine Form überführt werden die eine gut durchströmbare Schüttung sicherstellt.

Besondere Umsicht muß der Probennahme gelten. Es ist darauf zu achten, daß eine repräsentative Menge entnommen wird. Dies wurde gemäß den geltenden Richtlinien (DIN 51701) durch mehrfaches Mischen, Teilen und erneutes Einmischen von Teilchargen gewährleistet.

Eine technische Siebanalyse konnte nicht durchgeführt werden, da die Form der Partikel (z.T. schlanke Späne) keine eindeutigen Aussagen über Länge und Breite der gesiebten Fraktionen zugelassen hätte. Daher wurden die Proben per Hand in Längenchargen gruppiert. Anschließend erfolgte innerhalb dieser eine Einteilung nach der mittleren Stärke der Partikel. Abbildung 11 zeigt die Summenkurve der Massenverteilung über der Partikellänge.

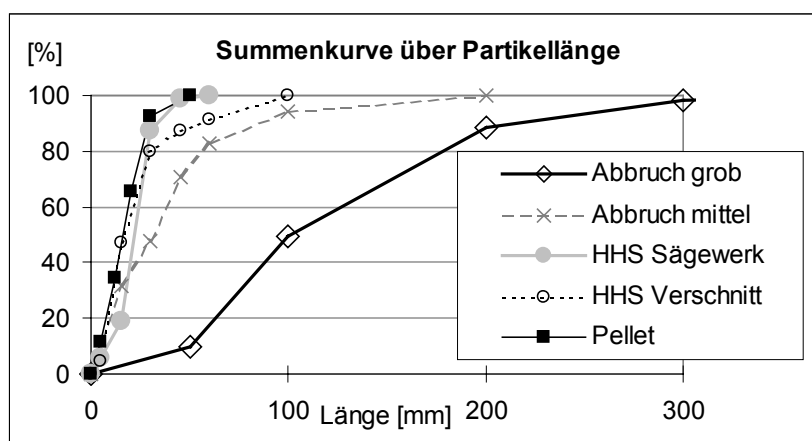


Abbildung 11 Summenkurve über der Partikellänge

Die Probe des grob geschredderten Abbruchholzes weist zum Großteil (90,4 Ma.-%) eine Spanlänge oberhalb 50 mm auf. Es folgt das feiner geschredderte Material, welches bereits zu 47,6 Ma.-% eine Spanlänge unterhalb 30 mm aufwies. Die anderen drei Proben lagen mit geringen Unterschieden im einzelnen Verlauf jeweils zu über 80 Ma.-% unterhalb dieser Grenze.

Analog zeigt Abbildung 12 die Verteilung der Partikelstärke.

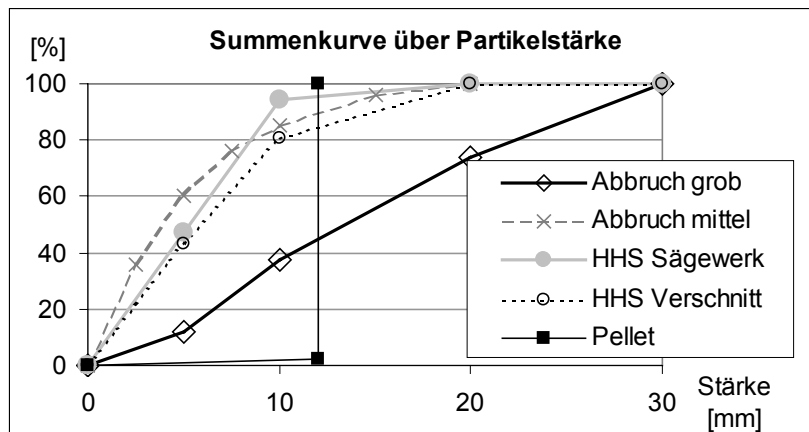


Abbildung 12 Summenkurve über der Partikelstärke

Erwartungsgemäß zeigt das grobe Schreddermaterial die weitaus stärksten Späne. Der feiner gebrochene Abbruch zeigt nahezu das Bild der Holzhackschnitzel. Bei diesen drei Brennstoffen sind etwa die Hälfte der Partikel im Mittel schmaler als 5 mm. Pellets haben eine durch die Preßmatrize vorgegebene einheitliche Stärke. Das Unterkorn (Abrieb, Bruch) hat hier mit 2,6 Ma.-% nur einen sehr geringen Einfluß.

Aus Partikellänge und mittlerer -breite errechnet sich durch Bildung des Quotienten der Formfaktor Φ_S (Spherität) als ein Maß der Sperrigkeit.

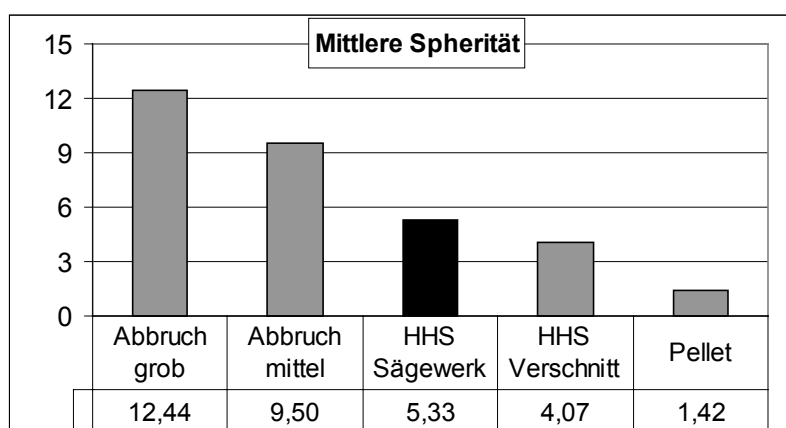


Abbildung 13 Partikelspheritäten verschiedener Brennstoffe

Für Abbildung 13 wurden die geometrischen Teilchargen der Brennstoffe mit ihrer Einzelspherität massengewichtet. Die Spherität zeigt ein sehr differenziertes Bild. Während das grobe Abbruchholz durchschnittlich 12,4mal länger als stark ist, beträgt dieser Wert bei den Pellet nur 1,42. Es kann festgestellt werden, daß mit kleiner

werdender Partikelgröße die Form kompakter wird und die Aufarbeitungsart die Spherität beeinflusst.

Die Sperrigkeit der Einzelpartikel wirkt sich stark auf die Schüttdichte aus, wie Abbildung 14 darstellt.

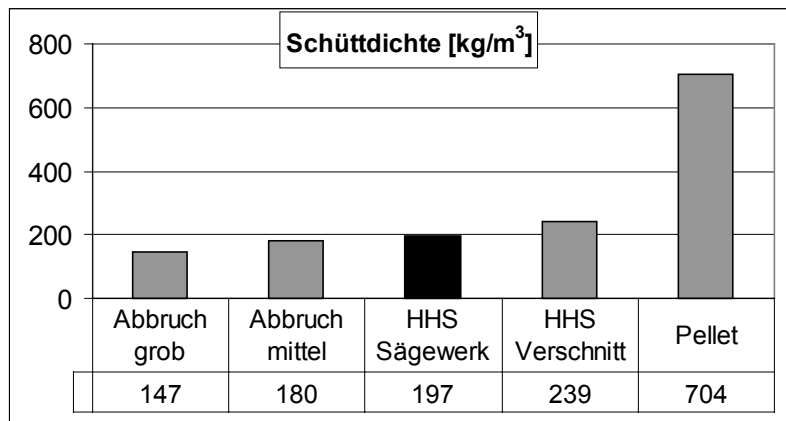


Abbildung 14 Schüttdichten verschiedener Brennstoffe

Das grobe Abbruchholz hat mit 147 kg/m^3 die geringste Schüttdichte. Über 180 kg/m^3 für das feiner Schreddergut bewegen sich die Werte für Holzhackschnitzel zwischen 197 kg/m^3 für den Versuchsbrennstoff und 239 kg/m^3 bei Straßenrandverschnitt. Für die Sägemehlpellet vervielfacht sich dieser Wert nahezu gegenüber dem erstgenannten Minimalwert. Ergänzt sei an dieser Stelle, daß für die ersten vier Brennstoffen von einer etwa gleichen Rohdichte des Materials (Holz etwa 700 kg/m^3) ausgegangen werden kann, während für die Sägemehlpellet, der Herstellung geschuldet, eine etwa doppelte Rohdichte von 1440 kg/m^3 ermittelt wurde.

Wichtig für das Verhalten der Schüttung im Vergaser ist des weiteren der Wert für die Porosität ε als Anteil des Gas- am Gesamtvolumen (auch Lückengrad).

$$\varepsilon = \frac{V_{\text{Lücke}}}{V_{\text{Schüttung}}} \quad []$$

$V_{\text{Lücke}}$ - Partikelfreies Volumen $[\text{m}^3]$

$V_{\text{Schüttung}}$ - Schüttungsvolumen $[\text{m}^3]$

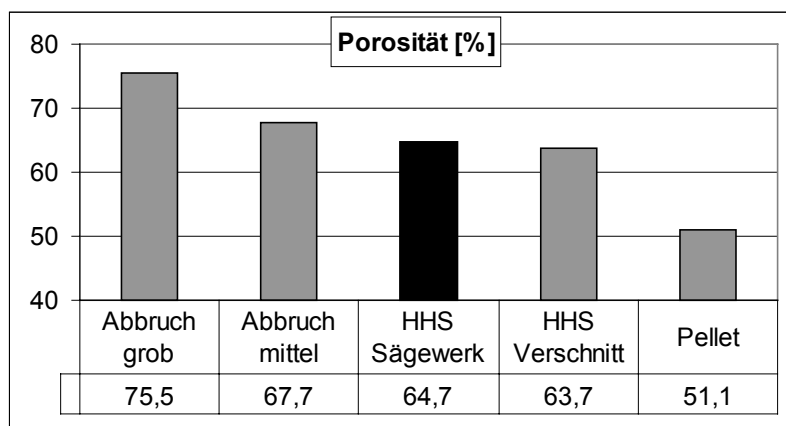


Abbildung 15 Porositäten verschiedener Brennstoffschüttungen

Für den groben Brennstoff ergibt sich der höchste Wert für die Porosität (Abbildung 15). Die Hackschnitzel zeigten mittelgroße Werte von 67,7 % bzw. 64,7 %. Die Pellet wiesen die am dichtesten gepackte Schüttung auf. Hier ist das Volumen etwa zur Hälfte durch Partikel ausgefüllt.

Die angeführten Vergleiche erlauben die Feststellung, daß der gewählte Versuchsbrennstoff, naturbelassene Holzhackschnitzel aus Sägewerksabfällen, in seinen geometrischen Eigenheiten ein mittleres Verhalten innerhalb der denkbaren Brennstoffpalette aufweist und somit für die Erarbeitung der prinzipiellen Prozeßtransparenz geeignet ist.

2.5 Versuchsbetrieb

2.5.1 Vergaser-Start

Vor der Inbetriebnahme des Vergasers wurde die externe Brennkammer mit Erdgas vorgeheizt, um von Beginn an eine vollständige Verbrennung der Produktgase zu gewährleisten.

Danach erfolgte der Start des Vergasers. Dazu war die Vorwärmung der Vergasungsluft auf etwa 400 °C vorgesehen. Dieser Wert reichte jedoch nicht zu einem zügigen Start der Vergasung aus, der Zeitraum bis zur Produktion von Brenngas lag bei mehrere Stunden.

Aus diesem Grund wurde zu einer direkten Zündung übergegangen. Da im Vergaser aufgrund des Rauchgas-Saugzuggebläses Unterdruck herrschte, konnte über eine der unteren Entnahmeöffnungen die Zündenergie durch Einbringen der

Flamme einer Hand-Lötbrenners direkt zugeführt werden. Bereits nach wenigen Minuten zeigte ein rapider Anstieg der Brennkammertemperaturen die Produktion des Brenngases an. Die Ergas-Stützflamme konnte dann außer Betrieb genommen werden.

Einen Vergleich der Wirkung des Zündungsregimes zeigen Abbildung 16 und Abbildung 17.

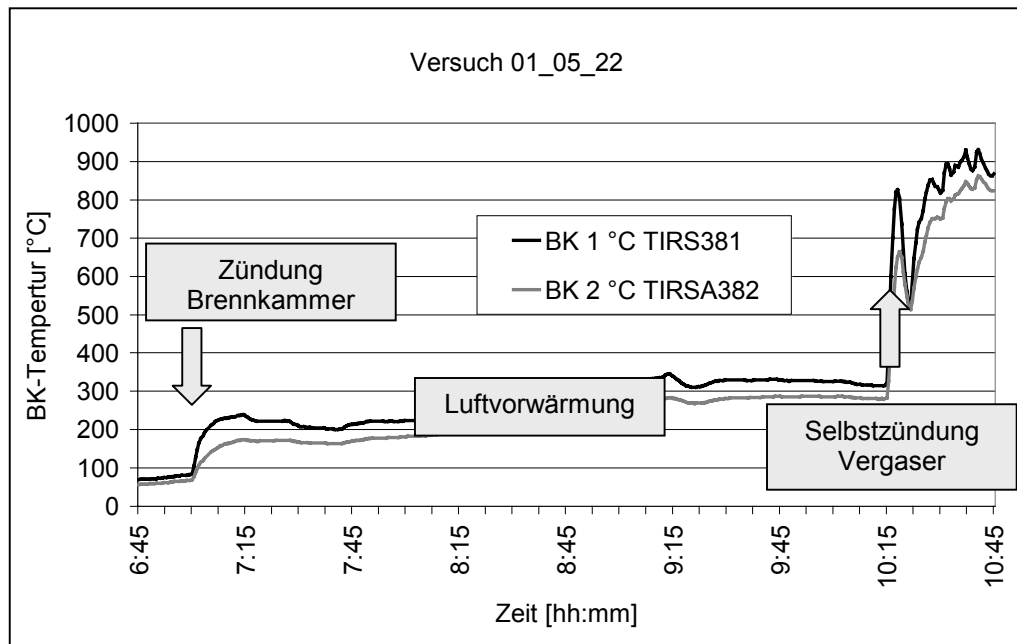


Abbildung 16 Brennkammertemperatur bei Zündung durch Luftvorwärmung

Durch Optimierung des Zündregimes konnte die Zeit bis zum eigentlichen Versuchsbeginn wesentlich reduziert werden.

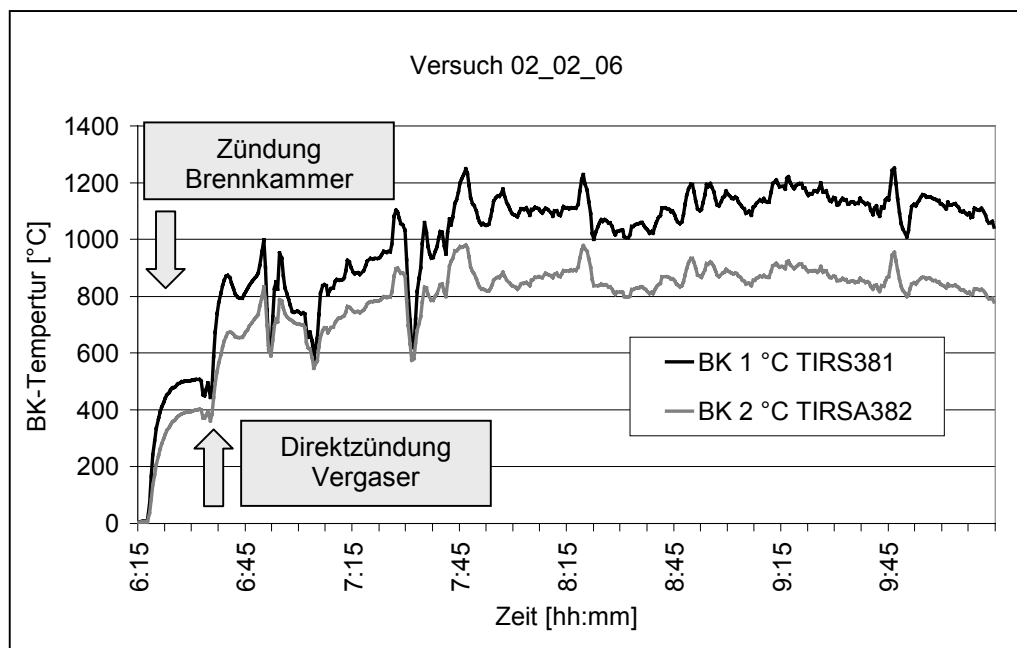


Abbildung 17 Brennkammertemperatur bei Zündung durch Lötflamme in Analyseöffnung

Um zu Beginn des Betriebes bei noch relativ niedrigen Temperaturen im Vergaser die vermehrte Produktion von Teeren zu verhindern, sollte die Erstbefüllung des Reaktors, zumindest im unteren Teil, aus flüchtigenfreier Holzkohle bestehen.

Nach dem Zünden des Vergasers wurde durch Schließen der Zündöffnung, Zufuhr der Vergasungsluft und Vorgabe der angestrebten Betriebsparameter der reguläre Vergasungsprozeß gestartet.

2.5.2 Versuchszeitraum

Aufgrund der Ausmauerung besitzt der Vergaser ein sehr träges Betriebsverhalten. Der Beginn der Messungen erfolgte daher erst nach etwa fünf Stunden, bei Erreichen eines im wesentlichen stationärer Betriebes. Ab diesem Zeitpunkt standen etwa sechs Stunden für die Durchführung von Versuchen zur Verfügung.

Im Zeithorizont weniger Minuten kam es zu relativ großen Schwankungen der analysierten Werte, wie in Abbildung 18 anhand des zeitlichen Verlaufes der dargestellten Brenngasbestandteile am Vergaseraustritt deutlich wird.

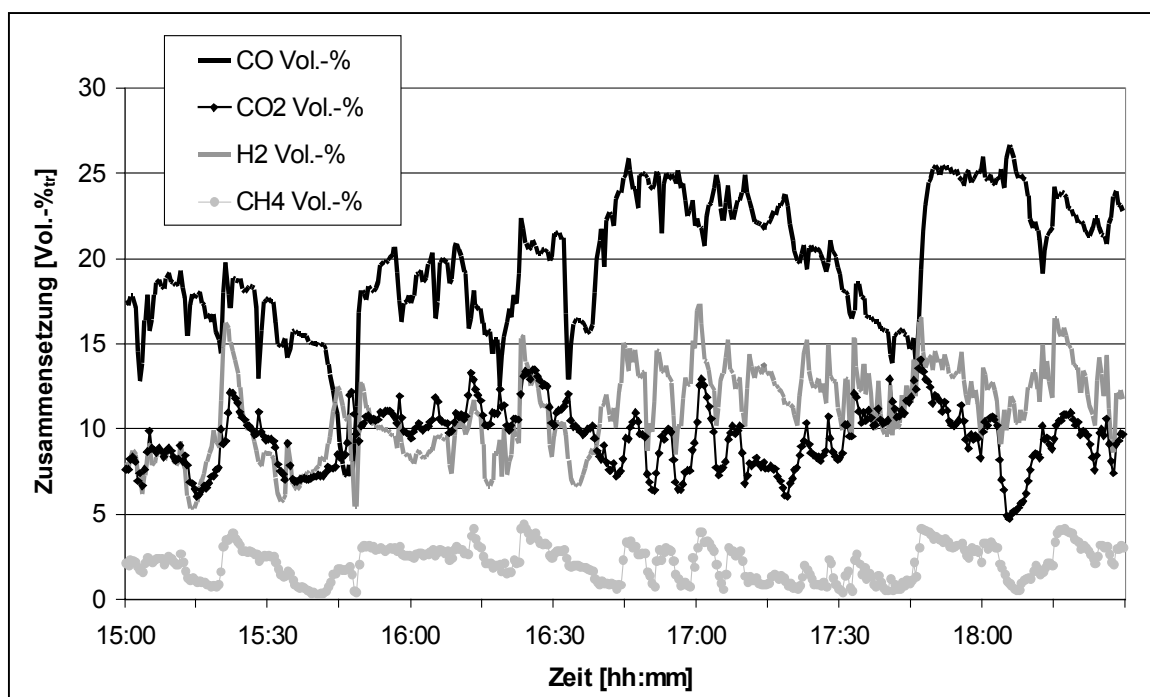


Abbildung 18 Beispielhafter Verlauf der Produktgaszusammensetzung

Für einen definierten Ort im Inneren des Reaktors sind diese Schwankungen der Gaszusammensetzung noch stärker ausgeprägt, da bis zur abgebildeten Analyse nach Vergaseraustritt bereits eine zeitliche und räumliche Vergleichmäßigung erfolgt ist. Dies hat für eine Meßstelle innerhalb des Reaktors die Notwendigkeit einer erhöhten Anzahl von Messungen zur Folge, um ein belastbares Ergebnis zu erhalten. Die intensive Analyse der inneren Vorgänge erfolgte daher anhand der mehrfachen Durchführung eines Referenzversuches unter den in Tabelle 9 aufgeführten Bedingungen.

Tabelle 9 Bedingungen des Referenzversuches

| | Wert | Einheit |
|-------------------------|----------|-------------------|
| Vergasungsluft | 12 | m ³ /h |
| Luftvorwärmung | keine | |
| Brennstoffdurchsatz | ca. 13,4 | kg/h |
| Wassergehalt Brennstoff | ca. 20 | Ma.-% |

Es ist zu ergänzen, daß die Angabe der Vergasungsluftmenge aufgrund mehrerer technisch bedingter Undichtheiten fehlerbelastet war.

3 MATHEMATISCHE MODELLIERUNG

3.1 Grundlegendes

3.1.1 Auswahl und Adaption des Basisprogrammes

Folgende Leistungsmerkmale sollte ein Simulationsprogramm zur Nachbildung der Festbettvergasung nach Meinung des Autors aufweisen.

- mehrdimensionale Strömungssimulation
- hohe Geometrieauflösung
- mehrere Phasen (hier Schüttung und Gas)
- physikalische Wechselwirkungen innerhalb und zwischen den Phasen
- geometrische Auflösung des Partikels (d.h. differenzierte Betrachtung über dem Radius mit Trocknungs-, Pyrolyse- und Koksumsatzfortschritt) sowie Umströmung der Einzelpartikel
- integrierte chemische Reaktionen
- hohe Anzahl gleichzeitig verwendbarer Spezies

Ein kommerzielles Programm, daß diese Forderungen umfassend befriedigt, ist derzeit nicht verfügbar. Dagegen gibt es hierfür eine Reihe von Eigenentwicklungen, insbesondere durch Forschungsinstitute und Hochschulen. In diese Projekte wurden umfangreiche personelle Ressourcen investiert.

Am Lehrstuhl Kraftwerkstechnik der TU Dresden standen solche Ressourcen zur kompletten Eigenentwicklung nicht zur Verfügung. Deshalb fiel die Entscheidung auf die Nutzung eines möglichst weit fortgeschrittenen Basisprogrammes und dessen Erweiterung auf den speziellen Anwendungsfall. Die Wahl fiel dabei aus im folgenden erläuterten Gründen auf eine Strömungsmechanik (CFD) - Standardsoftware.

Diese Softwarepakete haben in einer Reihe von Anwendungen für Fluidströmungen ihre Zuverlässigkeit bewiesen. Mit ihnen wurden bereits Erfahrungen zur Simulation von Gas-, Öl-, und Staubfeuerungen gesammelt. In verschiedenen Forschungsprojekten wurden sie erfolgreich der Validierung unterworfen /11/. Sie stellen eine hohe Geometrieauflösung (finite Volumina), eine ausgereiften Strömungssimulation und komfortable Auswertungswerkzeuge bereit.

Das Ergebnis der Simulation ist eine auf Stützstellen basierende Nachbildung der Stoff- und Energieströme.

Mittels Schnittstellen zur Einbindung von Unterprogrammen bietet diese Software die Adaption auf die spezifischen Belange des Nutzers, im vorliegenden Fall auf die Erfordernisse der Festbettvergasung. Dabei handelte es sich um Wechselwirkungen innerhalb sowie zwischen den zwei Phasen Gas und Schüttung. Diese begründen sich in Reaktionen, Strömungseinflüssen sowie im Wärme- und Stofftransport und schlagen sich in Quelltermen für die Massen-, Energie- und Impulsbilanzen sowie in veränderten Stoffwerten in den einzelnen Rechenzellen nieder.

Die Grundlagen zur Modellauswahl bildeten im wesentlichen Sekundärliteratur /57/, /20/ und /72/, da das Ziel der vorliegenden Arbeit die grundsätzliche Nachbildung des Prozesses war. Für weiterführende Arbeiten ist eine Fülle von Primärliteratur, aufgelistet z.B. in /24/ und /50/, auszuwerten.

Im Basispaket enthaltene Modelle

Aus dem oben aufgeführten Forderungskatalog an das Simulationsprogramm wurden folgende Punkte bereits durch das CFD-Basispaket abgedeckt und konnten durch den Bearbeiter innerhalb der grafischen Oberfläche entsprechend parametrisiert werden.

- Mehrdimensionale Strömungssimulation
- Mehrphasen-Betrachtung
- Hohe Geometrieauflösung
- Wärmetransport innerhalb der Phasen
- Behandlung mehrerer Spezies
- Definition variabler Randbedingungen

Mehrdimensionale Strömungssimulation

Das praktische Vergleichsobjekt ließ eine 2D-Betrachtung unter Annahme von Axialsymmetrie zu. Der Übergang auf 3D ist, allerdings mit massiv erhöhtem Rechenaufwand, möglich.

Mehrphasen-Betrachtung

Da diese Forderung nicht für beide Phasen innerhalb eines gemeinsamen Rechengitters durchgeführt werden konnte, erfolgte die parallele Berechnung in zwei getrennten, geometrisch identischen Gittern zu jeweils einem eigenen Strömungsfeld für die zwei Phasen Gas und Schüttung. Die Wechselwirkungen mußten vom Autor integriert werden (siehe unten).

Hohe Geometrieauflösung

Dieser Parameter wird nicht durch das Programm, sondern durch die zur Verfügung stehende Rechnerkapazität limitiert. Als ein Kompromiß zwischen möglichst feiner Auflösung und einer praktikablen Rechenzeit wurde vom Bearbeiter eine Ausdehnung der zu bilanzierenden Einzelzelle von minimal 2 mm gewählt.

Wärmetransport innerhalb der Phasen

Im Rechengitter der einzelnen Phasen wird der Wärmetransport innerhalb der Energiebilanz entsprechend den vom Nutzer bestimmten Nebenbedingungen berechnet.

Behandlung mehrerer Spezies

In der Gesamtmassenbilanz wird die Entstehung, Strömung sowie der Verbrauch von Einzelspezies unterstützt. Die Anzahl der definierten Spezies beeinflusst die Rechendauer und wurde deshalb auf die 10 wichtigsten Stoffe beschränkt.

Definition variabler Randbedingungen möglich

Neben der Festlegung von definierten Massen- oder Volumenströmen für Ein- oder Austritte ist die Wahl von variablen Zuströmungen möglich. Dies bietet sich im vorliegenden Fall für den Verbrauch an Brennstoff an.

Vom Autor hinzugefügte Modelle

Ergänzend wurden die in Tabelle 10 aufgelisteten Modelle durch den Autor mittels Unterprogrammen eingebunden. Deren Erläuterung erfolgt in den entsprechenden Kapiteln zu den physikalischen (3.2) und chemischen Annahmen (3.3).

Tabelle 10 Übersicht der hinzugefügten Modelle und Parameter

| | Art der Einbindung in das Basisprogramm für die Einzel-Zelle (Phase) |
|--|--|
| Nachbildung des Strömungswiderstandes durch Schüttung | Quellterm in Impulsbilanz (GAS) |
| Nachbildung der Flechtströmung durch Makrodiffusion | Rückgabe Stoffwert (GAS) |
| variable Gasviskosität | Rückgabe Stoffwert (GAS) |
| variable Gasdichte | Rückgabe Stoffwert (GAS) |
| variable Wärmeleitung | Rückgabe Stoffwert (GAS und FEST) |
| Wärmeübertragung zwischen den Phasen | Quellterm in Energiebilanz (GAS und FEST) |
| Chemische Reaktionen (11 Reaktionen mit 10 Spezies) | Quellterme in Energie- und Massenbilanz (GAS und FEST) |

An dieser Stelle sollen die wichtigsten Vereinfachungen, die der erarbeiteten Simulation anhaften, genannt und anschließend in ihrem Einfluß diskutiert werden:

- Homogenes Partikel
- Konstante Schüttungseigenschaften
- Behandlung der Schüttung als Fluid
- Adiabater Reaktor
- Vernachlässigung des Ascheaustrages
- Vereinfachter Strahlungsaustausch
- Vereinfachtes Pyrolysemodell
- Vereinfachte Stoffwerte

Homogenes Partikel

In der Realität bildet sich während der Vergasung über dem Partikelradius ein Profil des Trocknungs-, Pyrolyse- und Abbrandfortschrittes aus. Diese umfassende Betrachtung des Einzelpartikels, gewöhnlich auf Basis der Fouriersche Wärmeleitung in Körpern realisiert, ist nicht ohne weiteres in die CFD-Basis

integrierbar. Bei Integration würde es sich beim Gesamtprozeß zwar um einen stationären Zustand handeln, für die Einzelzelle müßte jedoch auf die instationäre Berechnung übergegangen werden, da sich für einen definierten Ort aufgrund der bewegten Partikel Lückenvolumen (Gas) und Partikel (Feststoff) abwechseln.

Autoren, die in Programmentwicklungen solche Modelle erarbeiten, bspw. /48/ und /79/, geben eine Grenzgröße von ca. 20 mm an, unterhalb der gegenüber Berechnungen, welche das Partikel nicht zusätzlich über seinem Querschnitt aufgelöst betrachten, kein signifikanter Unterschied in den Ergebnissen besteht. Die Partikelgröße des betrachteten Brennstoffes lag, insbesondere bei fortgeschrittenem Prozeß, unterhalb dieses Grenzwertes, so daß bei dieser Vereinfachung von einem vertretbaren Fehlereintrag ausgegangen werden kann.

Konstante Schüttungseigenschaften

Aufgrund der fehlenden Einzelpartikelbetrachtung erfolgt auch kein Informationstransport zwischen den Zellen bzgl. Eigenschaften wie Körngrößenverteilung oder Porosität der Schüttung. Diese Parameter wurden in den Modellen mit konstanten Werten, wie sie in dem am stärksten interessierenden Bereich zu erwarten waren, belegt.

Behandlung der Schüttung als Fluid

Das Strömungssimulationsprogramm kann mangels der Nachbildung der Kräftebilanzen an den Partikelgrenzen Spezifika einer Schüttung, die das reale Fließverhalten kennzeichnen, nicht nachbilden. Durch Einbindung einer Kraftkomponente zur Beachtung der Erdanziehung und einer hohen Modellviskosität konnte jedoch ein sinnfälliges Strömungsverhalten des Pseudofluides Schüttung erreicht werden.

Adiabater Reaktor

Durch Umwandlung der Randbedingung Symmetrie (d.h. hier: keine Gradienten an der Wand) zu einer definierten Wärmestromdichte oder Festlegung eines k -Wertes könnte der Einfluß von nichtadiabaten Bedingungen untersucht werden. Jedoch ist in der vorliegenden Arbeit aufgrund der guten Isolierung die Betrachtung des zum Vergleich stehenden Modellvergasers als adiabaten Reaktor gerechtfertigt.

Vernachlässigung des Ascheaustrages

Auf die Spezies Asche wurde in der Simulation verzichtet. Mit der Festlegung einer zweiten Randbedingung, Ascheaustrag, wäre das Rechengebiet Schüttung überbestimmt, da der Rechnung aufgrund der Massenbilanz der Spezies Asche die Menge an zugeführtem Brennstoff aufgeprägt würde. Dieser signifikante Wert, der sich in der Luftzahl λ wiederfindet, soll jedoch ein Ergebnis der Rechnung sein. Des weiteren wird in der Realität eines absteigenden Gleichstromvergasers ein Großteil der Asche als Flugasche mit dem Gasstrom ausgetragen, der dann in der Gasströmung bilanziert werden müßte. Für weiterführende Arbeiten wäre mit Einführung einer weiteren „Reaktion“ Ascheabtrag und einer dem Austragsrythmus des Modellvergasers angelehnten Randbedingung Restkoksaustrag eine Einbindung dieses Problemkreises zweckmäßig.

Aufgrund des geringen Ascheanteiles im untersuchten Brennstoff von $<1 \text{ Ma.-%}$ ist nicht mit einem gravierendem Fehlereintrag wegen dieser Vereinfachung zu rechnen.

Vereinfachter Strahlungsaustausch

Der Einfluß des Strahlungsaustausches in Schüttungen ist aufgrund der geringen Ausdehnungen der durchstrahlbaren Hohlräume gering. Daher wurde mit einem äquivalenten Strahlungswärmeleitkoeffizienten in der Schüttungs-Phase nur ein vereinfachtes Modell integriert. Eine Implementierung aufwendigerer Strahlungsmodelle wäre mit hohen Unsicherheiten verbunden, die in weiterführenden Arbeiten für die Festbettvergasung untersucht werden sollten.

Vereinfachtes Pyrolysemodell

Aufgrund der Simulationsart, welche mehrdimensional auf kinetischen Betrachtungen beruht, mußte, um Massen-, Elementar- und Brennstoffenthalpiebilanz exakt einhalten zu können, ein konstantes Produktspektrum der Pyrolysereaktion angenommen werden. Im Kapitel zur Chemischen Reaktion erfolgt eine genauere Erläuterung.

Am Ort der Pyrolysereaktion ist mit einem starken Einfluß dieser Vereinfachung zu rechnen. Dieser verringert sich jedoch im Prozeßfortschritt aufgrund der Gleichgewichtsreaktionen zwischen den gasförmigen Pyrolyseprodukten.

Vereinfachte Stoffwerte

Um die signifikante Temperaturabhängigkeit von Wärmeleitkoeffizienten und Viskosität zu berücksichtigen, wurde hierzu auf die bekannten Modelle für Luft zurückgegriffen. Dies begründet sich darin, daß sowohl im Brenngas als auch in Luft Stickstoff als Hauptkomponente auftritt.

Die Unwägbarkeiten in Modellen und Parametern sowie der begrenzende Faktor Rechnerkapazität /22/ verlangten für die Festlegung der Vereinfachungen ein Abwägen zwischen dem Aufwand zur Erhöhung der Genauigkeit einerseits und dem zu erwartenden Gewinn an zusätzlichen Informationen andererseits. Daher wurden jeweils Basis-Modelle gewählt, welche die wichtigsten Einflußgrößen berücksichtigen, ohne nach Meinung des Bearbeiters zu einer Pseudogenauigkeit zu führen.

Trotz der Vereinfachungen sollen mit dem erarbeiteten Simulationsprogramm erste, im wesentlichen qualitative, Aussagen zum mehrdimensional betrachteten Inneren des Prozesses getroffen werden. Finden sich die im Experiment gewonnen Erkenntnisse in der Rechnung wieder, kann mit dessen Hilfe in aufbauenden Arbeiten zur Verbesserung des Prozesses durch Untersuchungen optimierter Geometrien und Prozeßbedingungen beigetragen werden.

Wichtiger Indikator für die Sinnhaftigkeit des Ergebnisses ist die Einhaltung der Gesamtbilanzen von Massen- Elementar- und Energieströmen (als Summe aus chemisch gebundener Energie und konvektiv transportierter Wärme). Deren Überprüfung wurde parallel mittels Tabellenkalkulation durchgeführt und ist im Anhang (Anlage 5) einsehbar. Die Fehler lagen im Bereich von unter drei Prozent bezogen auf die Ausgangswerte des entsprechenden Parameters.

3.1.2 Basis CFD

Als prägnante Definition von CFD sei /54/ zitiert. Zur Erläuterung der Bilanzierung um ein differentielles Element ist Abbildung 19 eingefügt.

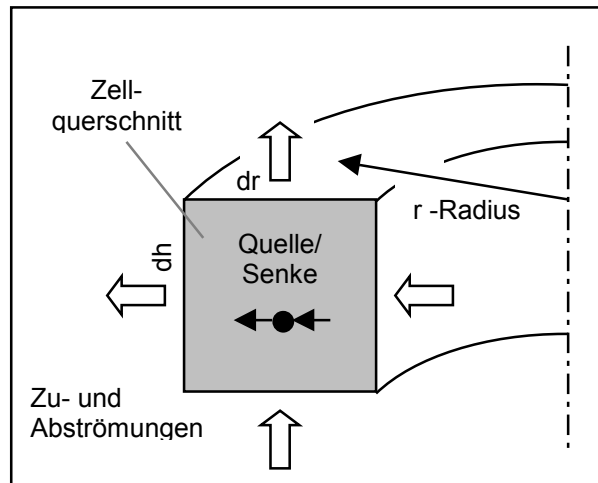


Abbildung 19 Bilanz um ein Volumenelement

„Die Abkürzung CFD steht für Computational Fluid Dynamics und kann mit dem Ausdruck computergestützte Strömungsmechanik treffend wiedergegeben werden.

...

Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie stellen in Verbindung mit einer Zustandsgleichung, die Dichte, Druck und Temperatur koppelt, ein System zur physikalischen Beschreibung einer Strömung kompressibler einphasiger Fluide bereit. Im Falle Newtonscher Medien wird die Impulserhaltung durch die sogenannten Navies-Stokes-Gleichungen geregelt. ...

In den Erhaltungsgleichungen stehen zeitliche Änderung am festen Ort und konvektiver Transport der betrachteten Strömungsgröße mit deren diffusivem Transport sowie Produktion und Vernichtung im Gleichgewicht. ...

Anstelle der kontinuierlichen analytischen Lösung liefert CFD das numerische Ergebnis an diskreten Stützstellen im Strömungsgebiet. ...

Die Bearbeitung eines Strömungsfalles mit CFD gliedert sich typischerweise in drei Arbeitsphasen, die mit den Begriffen Preprozessing (Gittergenerierung), Solverschritt (oder Löser-) und Postprocessing (Auswertung) bezeichnet werden."

Aufgrund bereits gesammelter Erfahrungen am Institut und seiner weiten Verbreitung in der Energietechnik wurde vom Bearbeiter das CFD-Programm Fluent 5.5 eingesetzt.

3.1.3 Einbindung des Unterprogrammes

Das Zusammenspiel zwischen Basis- und Unterprogramm soll anhand Abbildung 20 erläutert werden.

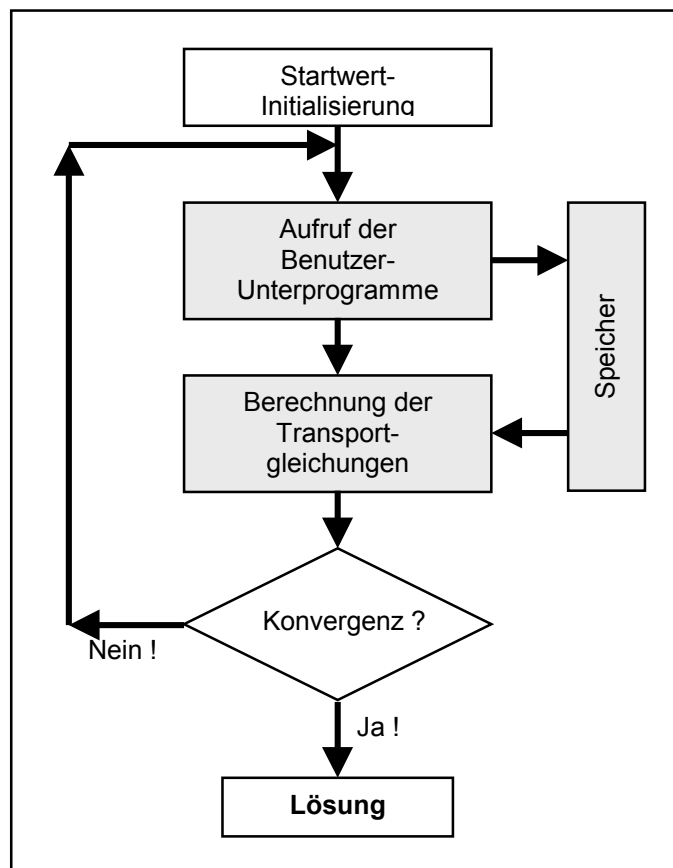


Abbildung 20 Einbindung Unterprogramm in die Arbeitsweise des CFD-Basisprogrammes

Startwert-Initialisierung

Vor der eigentlichen Berechnung steht die Festlegung der Startwerte in jeder einzelne Zelle für Druck, Geschwindigkeit, Temperatur und Massenanteilen der Spezies. Da es sich um ein iteratives Lösungsverfahren handelt, kommt der Startwertwahl eine hohe Bedeutung zu. Je besser die Startwerte den Ergebnissen entsprechen, desto schneller und zuverlässiger werden diese erreicht. Im vorliegenden Fall mußte durch hinreichend hohe Temperaturen der Beginn der

Reaktion sichergestellt werden. Dies kann, in Entsprechung zur Realität, als Einbringung der Zündenergie verstanden werden.

Neben der pauschalen Belegung innerhalb der Dialogfenster des Basisprogrammes ist mittels eines Initialisierungs-Unterprogrammes jede Zelle in Abhängigkeit ihres Ortes innerhalb des Reaktors sehr differenziert mit sinnvollen Startwerten belegbar.

Iterationsschritt

Zu Beginn eines jeden Iterationsschrittes erfolgt der Aufruf der Benutzerprogramme. Mit ihnen kann Einfluß auf die nachfolgende Numerische Berechnung genommen werden. Dies geschah im vorliegenden Fall einerseits durch Anpassung von Stoffwerten und andererseits durch Bestimmung von Quelltermen für die Berechnung der Transportgleichungen. Die Ergebnisse werden für den nachfolgenden Zugriff im Speicher hinterlegt.

Die Berechnungsmethode zur Lösung der Simulation basiert auf Transformationen der fluidmechanischen Erhaltungsgleichungen auf eine zur numerischen Lösung geeignete Form über die Schritte Integration, Diskretisierung und Linearisierung /54/. Dies ist jedoch nicht Gegenstand der Arbeit.

Um ein starkes Schwingen zwischen den Iterationsschritten zu verhindern, kann über Relaxationsfaktoren die errechnete Änderung eines Parameters vermindert und damit eine Dämpfung erreicht werden. Zwar verlängert sich hierbei die Rechendauer zunächst. Durch den Zugewinn in der Stabilität der Rechnung wird dies jedoch relativiert.

Überprüfung auf Konvergenz

Nach dem Iterationsschritt erfolgt innerhalb des CFD-Basisprogrammes die Konvergenzprüfung für die Geschwindigkeiten, Speziesverteilung und Temperatur. Wurden die vom Nutzer vorgelegten Konvergenzkriterien nicht erreicht, beginnt die Schleife erneut.

Im vorliegenden Fall der Behandlung der zwei Rechengitter wird in der Kontinuität der Massenbilanz der Einzelzelle keine Konvergenz erreicht. Nach einem offensichtlichen Einschwingen der Ergebnisse und bei paralleler Überprüfung der Gesamtbilanz konnte jedoch vom Erreichen der Lösung ausgegangen werden.

Änderung von Rand- oder Nebenbedingungen

Bei Änderungen wichtiger Parameter muß sehr vorsichtig vorgegangen werden, da die Rechnung aufgrund der großen Menge an Einflußgrößen eine hohe Empfindlichkeit gegenüber Instabilität und Absturz aufweist. Dem kann, neben herabgesetzten Relaxationsfaktoren, durch ein schrittweises Vorgehen begegnet werden.

3.1.4 Beschreibung des Unterprogrammes

Unterprogramme für das Basisprogramm Fluent, sogenannte UDF (User Defined Function), können in der Programmiersprache C erstellt werden.

Eine Übersicht zu den Funktionen des erstellten Unterprogrammes zeigt Abbildung 21.

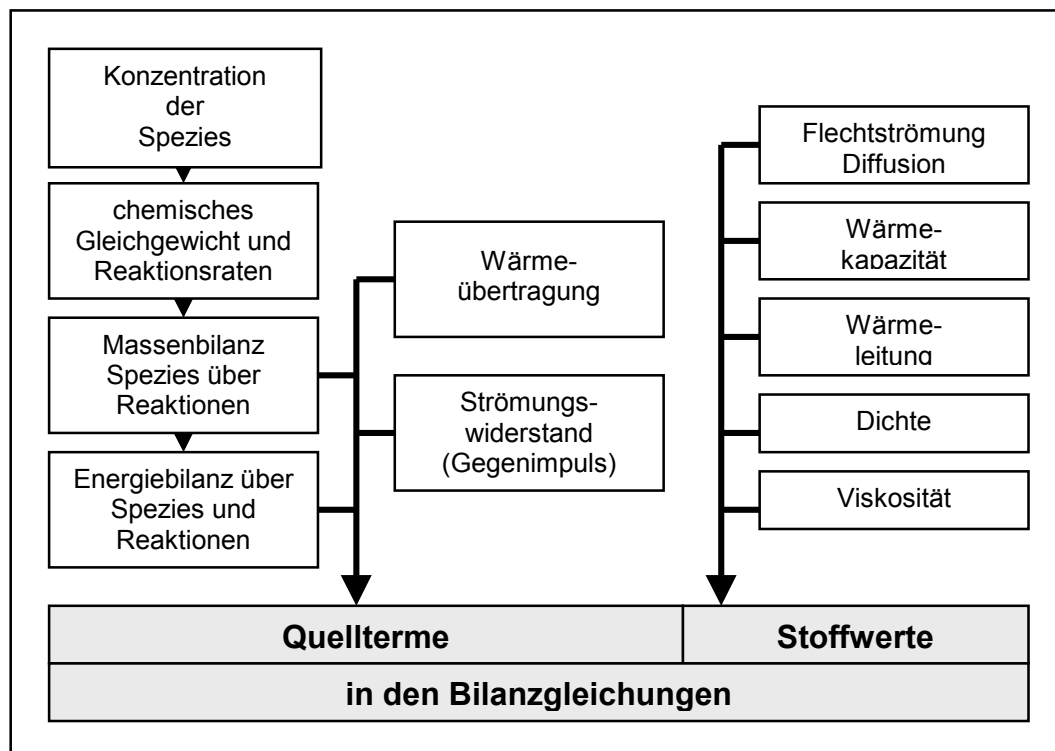


Abbildung 21 Funktionsübersicht des Unterprogrammes

Nachfolgend werden die dargestellten Routinen (Abbildung 22) sowie die Zugriffsweise des Basisprogrammes (Tabelle 11) näher erläutert.

➔ **vor Beginn des Iterationsschrittes** (Ergebnisse zwischengespeichert)

Rechenschleife über alle Zell-Nummern (identisch in beiden Rechengebieten)

resultierende Geschwindigkeit

$$C_{\text{res}} = f(C_x, C_y)$$

Ähnlichkeitskennzahlen, Stoffwerte

$$(Re, Sh, Pr, Pe, Nu, \alpha, \lambda, \sigma, c_p, \eta)$$

Konzentration

Schleife über Spezies i

$$\text{Konzentration}_i = f(\text{Gewichtsanteil}_i, \text{Dichte}_i, \text{Molmasse}_i)$$

$$\text{Konzentration}_{\text{ges, Phase}} = \sum (\text{Konzentration}_{i, \text{Phase}})$$

Reaktionsraten

Schleife über Reaktionen k

$$\text{Rate}_k = f(\text{Temp.}, \text{Konzentrationen}, \text{Kinetik- u. Gleichgewichtsdaten})$$

Massenbilanz

Schleife über Spezies i

Schleife über Reaktionen k

$$\text{Massenquelle}_{i, k} = \text{Reaktionsrate}_k \cdot \text{Stöchiometrikoeffizient}_{i, k}$$

$$\text{Massenquelle}_{i, \text{ges}} = \sum (\text{Massenquelle}_{i, k})$$

$$\text{Massenquelle}_{\text{GAS}} = \sum (\text{Massenquelle}_{\text{Gase}})$$

$$\text{Massenquelle}_{\text{FEST}} = \sum (\text{Massenquelle}_{\text{Feststoffe}})$$

Energiebilanz der Reaktionen

Schleife über Reaktionen k

$$\text{Wärme}_{\text{Rea}, k} = \text{Reaktionsrate}_k \cdot \Delta H_{R, k}$$

$$\text{Wärme}_{\text{Rea}, \text{ges}} = \sum (\text{Wärme}_{\text{Rea}, k})$$

Energiekorrektur (GAS ⇌ FEST) aufgrund der Massenbilanz

Schleife über FEST-Spezies i

$$\text{Wärme}_{\text{korr}, i} = \text{Massenquelle}_i \cdot c_{p,i}(T) \cdot (T - 293,15 \text{ K})$$

$$\text{Wärme}_{\text{korr}, \text{ges, FEST}} = \sum (\text{Wärme}_{\text{korr}, i})$$

Energiekorrektur (GAS ⇌ FEST) aufgrund Wärmeübergang ΔT

$$\text{Wärme}_{\Delta T} = f(\Delta T, \text{spez. Oberfläche}, \alpha)$$

Gegenimpuls GAS

$$\text{Impuls}_x = f(c_x, \dots), \text{Impuls}_y = f(c_y, \dots)$$

Abbildung 22 Struktogramm des Unterprogrammes

➔ **während des Iterationsschrittes**

(das Basisprogramm greift in der Einzelzelle auf die Rückgabefunktion zu)

Tabelle 11 Rückgabefunktionen

| | Strömungsgebiet GAS | Strömungsgebiet FEST (Schüttung) |
|---|---|--|
| Massenquellterm | Einzelpezies: Massenquelle \dot{m}_i gesamt: Massenquelle \dot{m}_{GAS} | Einzelpezies: Massenquelle \dot{m}_i gesamt: Massenquelle \dot{m}_{FEST} |
| Energiequellterm | + Wärme \dot{Q}_{Rea} + Wärme $\dot{Q}_{\Delta T}$ - Wärme $\dot{Q}_{\text{kor, ges, FEST}}$ | - Wärme $\dot{Q}_{\Delta T}$ + Wärme $\dot{Q}_{\text{kor, ges, FEST}}$ |
| Impulsquellterm | axial-Richtung: Impuls \dot{I}_x radial-Richtung: Impuls \dot{I}_y | |
| Stoffwerte Einzelpezies - Dichte - Diffusion - dyn. Viskosität - spez. Wärmekap. - Wärmeleitkoeff. | $\rho = \rho_{\text{Idealgas}} \cdot \epsilon$ ($\epsilon = \text{konst}$) $\sigma = f(T)$ - $c_p = f(T)$ $\lambda = f(T)$ für Luft | Schüttdichte = konst - - $c_p = f(T)$ $\lambda = \text{konst}$ |
| Stoffwerte Phase - Dichte - Diffusion - dyn. Viskosität - spez. Wärmekap. - Wärmeleitkoeff. | Mischungsregel Fluent $\sigma = \sigma_0 + \sigma_{\text{Flechtströmung}}$ $\eta = f(T)$ für Luft Mischungsregel Fluent $\lambda = \lambda_{0, \text{Gas}}(\epsilon) + \lambda_{\text{Flechtströmung}}$ | Mischungsregel Fluent $\sigma \rightarrow 0$ $\eta \rightarrow \infty$ Mischungsregel Fluent $\lambda = \lambda_{0, \text{Fest}}(\epsilon) + \lambda_{\text{Strahlung}}$ |

Quellterme für Massen-, Energie- und Impulsbilanz

Die Berechnungen werden separat für jede Zelle innerhalb einer Schleife über die Gesamtzahl durchgeführt. Der Zugriff des Basis-Programmes auf die Ergebnisse geschieht durch Aufruf der entsprechenden Rückgaberoutinen. Die Zuordnung erfolgt innerhalb der Definition der Randbedingungen der einzelnen Phase (Dialog Boundary Condition).

Wesentliche Quellterme für die Massen- und Energiebilanzen resultieren aus den chemischen Reaktionen. Als Grundlage zu deren Berechnung dient die Ermittlung der Konzentrationen der Einzelpezies zu Beginn der Zellenschleife. Danach folgt

die Berechnung der Reaktionsraten auf Basis voraus gestellter Gleichgewichtsbetrachtungen.

Mit einer Schleife jeder Einzelspezies über alle Reaktionen wird deren Massenbilanz (z.B. udf Quelle_O2) ermittelt. Die Summierung über alle Spezies einer Phase ergibt dann deren Gesamtmassenquellterm.

Eine weitere Schleife über alle Reaktionen summiert, bei Multiplikation der Einzelreaktionsenthalpie mit der jeweiligen Reaktionsrate, auf die gesamte durch Reaktionen freigesetzte Energie in der Zelle. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß sich die Temperaturabhängigkeit der Reaktionsenthalpien aufgrund der Bilanzierungsart der ebenfalls temperaturabhängigen spezifischen Wärmekapazitäten bereits im Basisprogramm ergibt.

Des weiteren ist die Korrektur der Energiebilanz aufgrund des Massenaustausches zwischen den Phasen zu führen.

Der Energieaustausch zwischen den Phasen aus der Nachbildung der Wärmeübertragung wird anschließend berechnet.

Die Summe aller Energiequellterme einer Zelle wird dann an das Hauptprogramm übergeben.

Abschließend erfolgt die Berechnung des durch die Schüttung verursachten Strömungswiderstandes in Form einer gegen die Strömung gerichteten Quelle in der Impulsbilanz. Dies geschieht einzeln für jede Dimension, im vorliegenden Fall für die axiale und radiale Strömungsrichtung.

Stoffwertermittlung

Die Routinen zur Berechnung der Stoffwerte werden vom Hauptprogramm entsprechend der dortigen Verwendung aufgerufen. Im Dialog zu den Eigenschaften der einzelnen Spezies bzw. der gesamten Phase erfolgt deren Zuordnung.

Wichtig für die exakte Wärmebilanz ist die Berücksichtigung temperaturabhängiger Wärmekapazitäten. Als weiterer anzupassender Stoffwert ist die temperatur- und porositätsabhängige Dichte zu nennen. Neben der Berechnung und Rückgabe der dynamischen Viskosität erfolgte außerdem die Übergabe einer angepaßten Makrodifffusion zur Nachbildung der Flechtströmung. Die genaue Beschreibung der verwendeten Modelle erfolgt im Abschnitt 3.2.

Eine ausführliche Erläuterung zum Quellcode des Unterprogrammes wurde in einer Dokumentation unternommen, die am Institut vorliegt.

3.1.5 Gittergenerierung

Wie bereits erwähnt, wurden zur Nachbildung der zwei Phasen zwei identische Gitter erstellt, um einen optimalen Zugriff zwischen den jeweils korrespondierenden Zellen zu gewährleisten. Da es sich im Experiment um einen rotationssymmetrischen Reaktor handelte, konnte auch in der Rechnung auf diese Vereinfachung zurückgegriffen und damit die Rechenzeit stark reduziert werden.

In Abbildung 23 ist die rechnerische Einzelbehandlung der zwei Strömungsgebiete und ihre Lage zur Rotationsachse dargestellt.

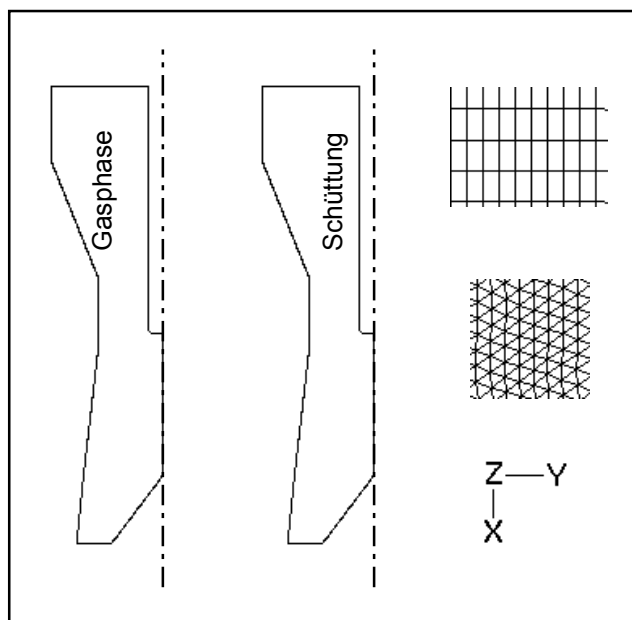


Abbildung 23 Zwei Bilanzräume, Gas und Schüttung

Für die spätere Rechnung erwies es sich als vorteilhaft, an Orten hoher Gradienten von Temperatur und Geschwindigkeiten (hier in der Nähe des Lufteinlasses) das Gitter zu verfeinern. An Stellen geringer Änderungen (hier jeweils im oberen Teil, empfahl sich zur Reduzierung der Rechenzeit ein gröberes Gitter.

Mit der minimalen Zellausdehnung von 2 mm zählte jedes der zwei Strömungsgebiete etwa 48.000 Zellen.

3.1.6 Festlegung der Randbedingungen

Für die Berechnungen wurden, neben den Definitionen der Wände als Begrenzung der Rechengebiete, drei für den Stoffstrom wesentliche Randbedingungen festgelegt. Sie sind in Abbildung 24 mit ihrer jeweiligen Lage dargestellt.

Dem Rechengebiet Schüttung wurde eine variable Randbedingung für den Brennstoffeintrag zugeordnet. Entsprechend dem Brennstoffverbrauch im Gesamtgebiet der Phase errechnete das Programm den zugehörigen Massenstrom am Eintritt.

An das Rechengebiet der Gasströmung grenzte einerseits die ebenfalls variable Randbedingung Brenngasauslaß. Andererseits befand sich hier die einzige mit einem festen Wert definierte Randbedingung „Vergasungsluft“. Es wurden der Massenstrom, die Eintrittstemperatur, sowie die Massenanteile der Spezies im eintretenden Medium festgelegt.

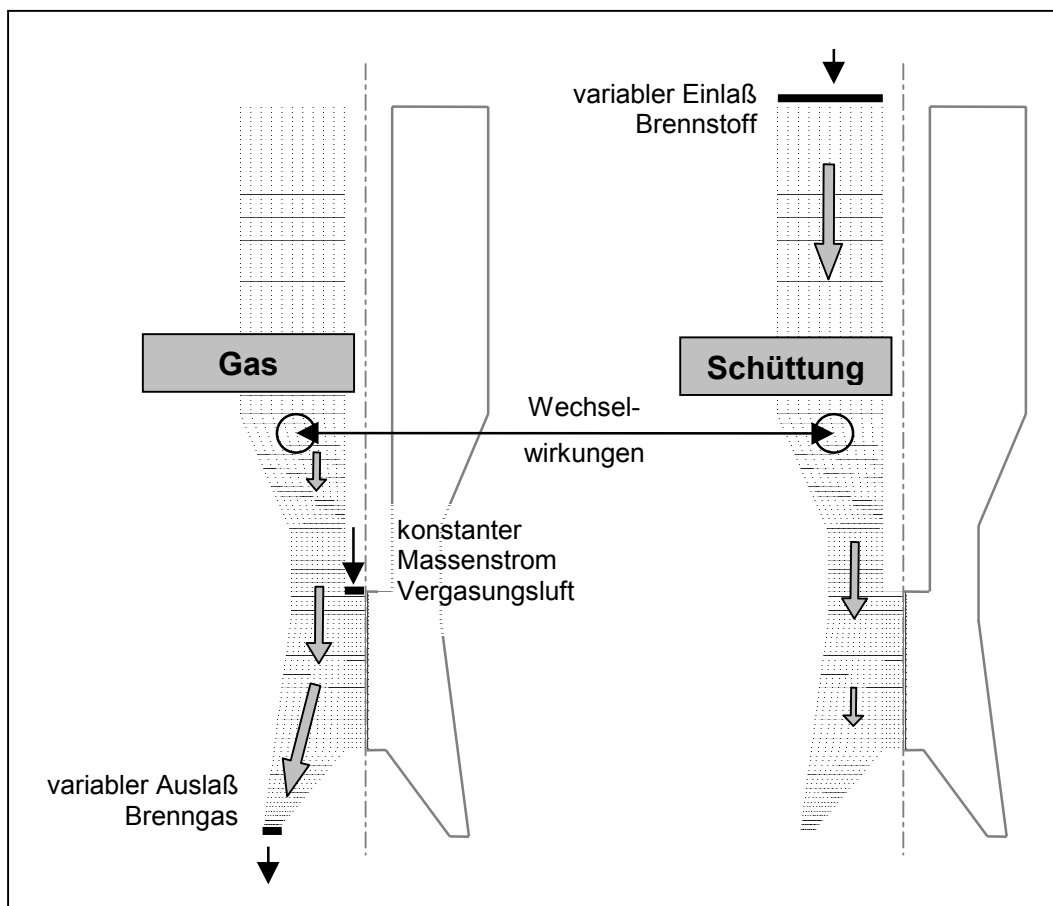


Abbildung 24 Schematisches Rechengitter mit Randbedingungen

Variation Wassergehalt

Zur Überprüfung der Eignung der mathematischen Simulation für die Nachbildung veränderter Betriebsbedingungen wurden Rechnungen unter Variation des Wassergehaltes des Brennstoffes durchgeführt.

Hierzu standen aus parallel durchgeführten Messungen Vergleichswerte zur Verfügung [77]. Der in den Experimenten eingesetzten Brennstoff-Wassergehalt bewegte sich in einem Bereich von 4,7 Ma.-% bis 48,3 Ma.-%. Er ist durch die natürliche Lufttrocknung begrenzt. In den Experimenten wurden die untersten Werte durch künstliche Vortrocknung mit Warmluft eingestellt. Die Werte deckten im wesentlichen den für absteigende Festbettvergaser möglichen Bereich ab.

Der Wassergehalt beschreibt den Massenanteil des im Brennstoff enthaltenen Wassers an der gesamten Brennstoffmasse. Im Gegensatz dazu bezieht sich der in der Praxis oft benutzte Wert der Feuchte auf die Masse des trockenen Brennstoffes, weshalb hier bei waldfrischem Holz auch Werte oberhalb 100 Ma.-% erreicht werden können.

Innerhalb des Bereiches des in den Experimenten eingesetzten Wassergehaltes wurden drei, in Tabelle 12 aufgeführte, Vergleichsrechnungen durchgeführt.

Tabelle 12 Randbedingungen Brennstoffeintrag bei Varianten-Berechnungen

| | | Wassergehalt Ma.-% | entspricht Feuchte u in % |
|------------|---|-----------------------|------------------------------|
| Rechnung - | 1 | 10,0 | 11,1 |
| | 2 | 20,0 | 25,0 |
| | 3 | 30,0 | 42,9 |

Sowohl im Experiment als auch in der Mathematischen Simulation wurden alle anderen Rand- und Nebenbedingungen konstant gehalten.

3.2 Physikalische Modelle

3.2.1 Wahl der geometrischen Parameter und der Strömungsart

Basis zur Berechnung wichtiger Strömungskenngrößen ist die Wahl der geometrischer Parameter. Für die Reaktorschüttung wurden die in Tabelle 13 enthaltenen mittlere Werte angenommen.

Tabelle 13 Parameter in der Modellierung

| | Wert | Einheit |
|--|------|---------|
| d_p - Partikeldurchmesser | 0,01 | m |
| l - charakteristische Abmessung | 0,01 | m |
| ε - Porosität (Lückenanteil Schüttung) | 0,5 | - |

Partikel, die aus dem Inneren des Reaktors entnommen wurden, zeigten im Mittel etwa den gewählten Durchmesser (siehe Kapitel 4.2).

Die Form des Brennstoffes nähert sich während des Prozesses, u.a. durch Abrasion und durch Zerbersten aufgrund innerer Spannungen, derjenigen einer Kugel. Wie für angeströmte Kugeln üblich /72/, wurde der Partikeldurchmesser auch als charakteristische Abmessung bestimmt.

Die Porosität des Ausgangsbrennstoffes betrug etwa 0,65 (siehe Kapitel 2.4.2). Die Porosität einer Kugelschüttung liegt dagegen zwischen 0,474 (einfache kubische Anordnung) und 0,259 (dichteste Packung) /57/. Als Mittel wurde daher der tabellierte Wert festgelegt.

Das CFD-Basisprogramm verlangt die Auswahl zwischen laminarer oder turbulenter Strömungsberechnung. Kriterium hierfür ist die Reynolds-Zahl, auf deren Berechnung weiteren unten eingegangen wird. Überschlägig wurde ein Wert von $Re \approx 70$ ermittelt.

Oberhalb eines kritischen Wertes $Re > Re_{kr}$ schließt sich ein Übergangsgebiet an. Dieser Bereich wird für Rohrströmungen mit 2000 ... 10000 angegeben, für die Durchströmung von Schüttungen gelten dagegen niedrigere Werte von 20 ... 5000 /69/. Im vorliegenden Fall ist daher mit beiden Strömungsarten zu rechnen, im oberen Reaktor eher laminar, nahe des Lufteintrittes zur Turbulenz neigend.

Im Basisprogramm wurde die laminare Berechnung aktiviert. Im Unterprogramm wurden jedoch physikalische Modelle ausgewählt, die den Übergang zur turbulenten Strömung berücksichtigen. Auf die Problematik wird bei deren Erläuterungen jeweils eingegangen.

3.2.2 Flechtströmung

In durchströmten Schütttschichten wird durch die sogenannte Flechtströmung eine dissipative Quervermischung hervorgerufen, welche den Wärme- und Stofftransport stark beeinflusst. „ ... (Sie) findet in den Hohlräumen der Schüttung beim Zusammentreffen von fluiden Massen aus unterschiedlichen radialen Positionen statt.“ /57/ Abbildung 25 verdeutlicht den Effekt. /57/

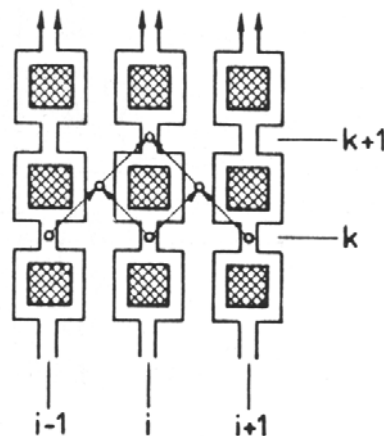


Abbildung 25 Modell zur Flechtströmung in einer durchströmten Schüttung

Eine hohe Bedeutung kommt hierbei der Peclet-Zahl Pe zu. Die dimensionslose Ähnlichkeitskennzahl wird als das Verhältnis des konvektiven Wärmetransportes zum Wärmestrom infolge Wärmeleitung verstanden. Sie ist das Produkt aus Reynolds-Zahl (Re - Verhältnis Trägheits- zu Reibungskraft) und Prandl-Zahl (Pr - Verhältnis Impuls- zu Wärmetransport):

$$Pe = Re \cdot Pr \quad []$$

mit

$$Re = \frac{c \cdot l}{\nu} \quad []$$

c - Geschwindigkeit [m/s]

l - charakteristische Abmessung [m]

ν - kinematische Viskosität [m²/s]

$$\text{Pr} = \frac{\eta \cdot c_p}{\lambda} \quad []$$

η - dynamische Viskosität [kg/(m s)]

c_p - spez. Wärmekapazität [J/(kg K)]

λ - Wärmeleitkoeffizient [W/(m K)]

Hierbei wird die kinematische Viskosität aus der weiter unten diskutierten dynamischen Viskosität über die Dichtebeziehung ermittelt.

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} \quad [\text{m}^2/\text{s}]$$

ρ - Gasdichte [kg/m³]

Als eine erste Näherung für den Diffusionskoeffizient δ wurde derjenige von Wasserdampf in Luft mit seiner Temperaturabhängigkeit nach /57/ gewählt.

$$\delta = \frac{2,252}{p} \cdot \left(\frac{T}{273} \right)^{1,81} \quad [\text{m}^2/\text{s}]$$

p - Druck [Pa]

T - Temperatur [K]

In dieser Literatur wird die Addition der porositätskorrigierten Gasdiffusion und der Diffusion aufgrund von Quervermischung als gerechtfertigt benannt.

Erstere wird mit dem Faktor $(1 - \sqrt{1 - \varepsilon})$ korreliert.

Die dissipative Quervermischung wird dagegen über die Peclet-Zahl und einen Faktor K, der in erster Näherung den Wert K = 8 annimmt, wiedergegeben.

Damit ergibt sich nach /57/ für den effektiven Diffusionskoeffizienten D der Schüttung:

$$D_{\text{Schüttung}} = \delta \cdot \left((1 - \sqrt{1 - \varepsilon}) + \frac{Pe}{8} \right) \quad [\text{m}^2/\text{s}]$$

3.2.3 Strömungswiderstand

Die Schüttung bewirkt einen Widerstand gegen die Gasströmung. Hierdurch werden, entgegen dem Falle eines Freistrahles, die Strömung verbreitert und Geschwindigkeitsspitzen schnell abgebaut. Die Folge ist ein erhöhter Druckverlust.

Die Implementierung in die Berechnung des CFD-Programmes erfolgte über eine dem Impulsstrom des Gases entgegen gerichtete volumenbezogene Kraftkomponente, welche dem längenbezogenen Druckverlust entspricht.

Zu dessen Berechnung wurde die folgende Beziehung verwendet /55/.

$$\frac{\Delta p}{l} = 150 \cdot \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \cdot \frac{\eta}{d_{part}^2} \cdot c + 1,75 \cdot \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \cdot \frac{\rho}{d_{part}} \cdot c^2 \quad \begin{matrix} [\text{Pa/m}] \\ \text{bzw. } [\text{N/m}^3] \end{matrix}$$

η - dynamische Viskosität

[kg/ms]

c - Geschwindigkeit des Fluides

[m/s]

Sie berücksichtigt in der Addition eines linear und eines quadratisch von der Geschwindigkeit abhängigen Termes sowohl den laminaren als auch den turbulenten Strömungsbereich.

Aus der Literatur /55/ ist anhand Abbildung 26 im Verlauf des Druckverlustes eines Fluides über der Reynolds-Zahl der Übergang zum quadratischen Verhalten bei höheren Re-Werten zu erkennen.

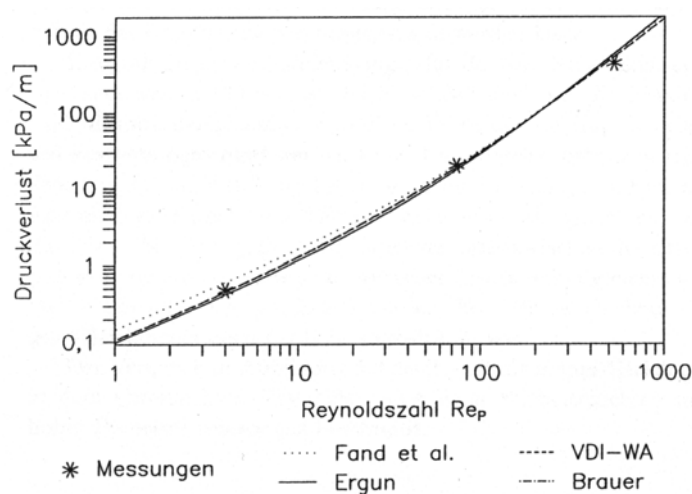


Abbildung 26 Druckverlust einer Kugelschüttung über der Reynolds-Zahl

3.2.4 Wärmeleitung

Aus der Bilanzierung der zwei Phasen in getrennten Rechengebieten folgt die in /57/ als Grenzfall diskutierte Parallelschaltung von Widerständen.

Der Gasphase wurde hierbei die aus der dissipativen Quervermischung und der Analogie von Stoff- und Wärmetransport resultierende Komponente zugeordnet. Der effektive Wärmeleitkoeffizient der Gasphase berechnet sich dann zu:

$$\lambda_{eff, Gas} = \lambda_{Fluid} \cdot \left((1 - \sqrt{1 - \varepsilon}) + \frac{Pe}{8} \right) \quad [W/(m \text{ K})]$$

Um eine Dopplung zu verhindern, wurde der konvektive Wärmetransport durch Diffusion im Basisprogramm deaktiviert.

Wie bereits erwähnt, wurde für den Fluid-Wärmeleitkoeffizient die temperaturabhängige Berechnungsmethode für Luft über einen Polynomansatz gewählt /44/.

In der festen Phase (Schüttung) wurde ein vereinfachtes Strahlungsmodell über die temperaturabhängige äquivalente Strahlungswärmeleitfähigkeit λ_{rad} implementiert /57/. Für die Strahlungslänge wird sowohl bei Kugel- als auch Zylinderschüttungen der Partikeldurchmesser vorgeschlagen.

$$\lambda_{rad} = 4 \cdot C_S \cdot \frac{1}{3} \cdot T^3 \cdot x_{rad} \quad [W/(m \text{ K})]$$

$$C_S - \text{Strahlungskoeffizient des schwarzen Strahlers} \quad [5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)]$$

$$x_{rad} - \text{Strahlungslänge} \quad [\text{m}]$$

Die Addition der porositätskorrigierten Partikelwärmeleitfähigkeit ergibt sich dann für die Schüttung analog zum effektiven Wärmeleitkoeffizienten der Gasphase:

$$\lambda_{eff, Schüttung} = \lambda_{Part} \cdot \sqrt{1 - \varepsilon} + \lambda_{rad} \quad [W/(m \text{ K})]$$

3.2.5 Wärmeübertragung

Der Wärmeübergangskoeffizient α zwischen Gasphase und Partikeln wird über die Ähnlichkeitskenngröße Nu Nusselt-Zahl (Verhältnis konvektiver Wärmestrom zu Wärmestrom durch Leitung) nach der Beziehung

$$Nu = \frac{\alpha \cdot l}{\lambda} \quad []$$

α - Wärmeübergangskoeffizient [W/(m² K)]

l - charakteristische Länge [m]

λ - Wärmeleitfähigkeit des Fluides (λ_0) [W/(m K)]

berechnet.

Für die Berechnung der Nusselt-Zahl mußte eine Auswahl aus einer Reihe von Modellen in der Literatur getroffen werden. Wichtige Einflußgröße ist auch hier die Reynolds-Zahl, deren Exponent in den Berechnungsmodellen mit der Turbulenz der Strömung zunimmt.

Um sowohl laminare als auch turbulente Strömungsgebiete zu berücksichtigen, bietet sich, äquivalent zu der weiter oben diskutierten Berechnung des Druckverlustes, eine Kombination aus laminaren und turbulenten Termen an. In Schüttungen gilt für die Umströmung der Einzelkugel folgendes Modell [72]:

$$Nu_{EK} = 2 + \sqrt{Nu_{lam}^2 + Nu_{turb}^2} \quad []$$

mit

$$Nu_{lam} = 0,664 \cdot \sqrt{Re} \cdot \sqrt[3]{Pr} \quad []$$

und

$$Nu_{turb} = \frac{0,037 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr}{1 + 2,443 \cdot Re^{-0,1} \cdot (Pr^{2/3} - 1)} \quad []$$

Die Übertragung auf die Nusselt-Zahl für die Schüttung erfolgt über einen Formfaktor:

$$Nu = f_a \cdot Nu_{EK} \quad []$$

welcher sich aus der Porosität errechnet:

$$f_a = 1 + 1,5 \cdot (1 - \varepsilon) \quad []$$

$$\varepsilon - \text{Porosität (Lückenanteil Schüttung)} \quad []$$

3.2.6 Weitere Gas-Stoffwerte

Weiterhin war die Berechnung folgender Stoffwerte des Gases notwendig:

- Viskosität
- spezifischer Wärmekapazität
- Wärmeleitkoeffizient
- Dichte

Die Temperaturabhängigkeit der Viskosität und des Wärmeleitkoeffizienten wurde für die Gesamtphase „Gas“ mit Polynomansätzen für Luft berücksichtigt /44/.

Die spezifische Wärmekapazität errechnete sich analog, jedoch für die Einzelspezies. Beispielhaft gilt für die Spezies i die folgende Form:

$$c_{p,i} = a + b \cdot T + c \cdot T^2 + \dots \quad [\text{J}/(\text{mol K})]$$

Für die Dichten der gasförmigen Spezies wurde Idealgasverhalten vorausgesetzt und diese gemäß der thermischen Zustandsgleichung berechnet.

Um das Strömungsverhalten, z.B. Verweilzeiten, richtig abzubilden, war die Korrektur über der Porosität notwendig.

$$\rho_i = \varepsilon \cdot \frac{p \cdot M_i}{\bar{R} \cdot T} \quad [\text{kg/m}^3]$$

p - Druck [Pa]

M_i - Molmasse der Spezies i [kg/mol]

\bar{R} - allgemeine Gaskonstante [8,3143 J/(mol K)]

3.3 Chemische Reaktion

3.3.1 Modellübersicht

Analog zur Vorgehensweise bei der Beschreibung der verwendeten physikalischen Modelle gibt Tabelle 14 eine Übersicht zur Berechnungsweise der chemischen Reaktion. Es schließt sich die Berechnung der resultierenden Massen- und Energiequellen an. Danach folgen die Kapitel zur Erläuterung der grundlegenden Mechanismen und zu den einzelnen Reaktionen.

Tabelle 14 Übersicht zur Berechnungsweise der Reaktionen

| | Gleichung zur Reaktionsrate \dot{r} in [mol/m ³ s] mit $k_{\text{Reaktion}} = k_0 \cdot e^{\left(\frac{-E_A}{R \cdot T}\right)}$ |
|--|---|
| Trocknung | $-k_{\text{Trock}} \cdot (T - 373,15\text{K}) \cdot \frac{X_{\text{Wassergehalt}}}{M_{\text{Wassergehalt}}}$ |
| Pyrolyse | $-k_{\text{Reaktion}} \cdot \frac{X_{\text{Brennstoff}, tr}}{M_{\text{Brennstoff}, tr}}$ |
| Krackung | $-k_{\text{Reaktion}} \cdot c_{\text{Teer}}$ |
| Koksoxidation Koksreduktionen (Bsp. Boudouard) | mit: $-k_{\text{eff}} \cdot a \cdot p_{\text{O}_2, \infty} \cdot \frac{X_{\text{Koks}}}{M_{\text{Koks}}}$ $-k_{\text{eff}} \cdot a \cdot \left(p_{\text{CO}_2} - \frac{1}{K_p} \cdot p_{\text{CO}}^2\right) \cdot \frac{X_{\text{Koks}}}{M_{\text{Koks}}}$ $\frac{1}{k_{\text{eff}}} = \frac{1}{k_{\text{Reaktion}}} + \frac{1}{k_{\text{Transport}}}$ |
| Gasoxidationen | $-k_{\text{Reaktion}} \cdot c_{\text{O}_2} \cdot c_i$ |
| Gas- gleichgewichte | $-k_{\text{Reaktion}} \cdot \left(c_{\text{Edukt}_A} \cdot c_{\text{Edukt}_B} - \frac{1}{K_c} \cdot c_{\text{Produkt}_C} \cdot c_{\text{Produkt}_D} \right)$ |

Die Gesamtmassenquelle einer Spezies i in einer Rechenzelle ergibt sich über deren Beteiligung an den Reaktionen k mit:

$$\rightarrow \text{Massenquelle}_i = M_i \cdot \sum_k \dot{r}_k \cdot \nu_{i,k} \quad [\text{kg/m}^3\text{s}]$$

\dot{r} - Reaktionsgeschwindigkeit (-rate) [mol/(m³ s)]

ν - Stöchiometrikoeffizient der Spezies i in der Reaktion k []

Der Energiequellterm durch die Reaktionswärmen in der Zelle ergibt sich analog:

$$\rightarrow \text{Energiequelle}_{\text{Reaktionen}} = \sum_k \dot{r}_k \cdot \Delta H_{R,k} \quad [\text{W/m}^3]$$

$\Delta H_{R,k}$ - Standardreaktionenthalpie der Reaktion k [J/mol]

3.3.2 Grundlagen zur Reaktionskinetik

Die Reaktionsgeschwindigkeit (-rate) \dot{r} gibt die Menge des pro Zeiteinheit umgesetzten Stoffes wieder und errechnet sich im Falle einer Reaktion erster Ordnung, d.h. es herrscht eine lineare Abhängigkeit zur Konzentration des Stoffes, gemäß folgender Beziehung /75/

$$\dot{r} = \frac{dc_{\text{Spezies}}}{dt} = -k \cdot c_{\text{Spezies}} \quad [\text{mol}/(\text{m}^3 \text{s})]$$

k - Geschwindigkeitskonstante [s⁻¹]

c - Konzentration [mol/m³]

Grundlage zur Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten für eine bestimmte Temperatur ist die Arrhenius-Beziehung. Mit ihr wird die exponentielle Entwicklung der Reaktionsintensität über der Temperatur wiedergegeben. Unter der Aktivierungsenergie wird der Betrag verstanden, welcher den Molekülen innewohnen muß, damit es bei einer Kollision zu einer Reaktion kommen kann /20/.

Der Ansatz lautet:

$$k = k_0 \cdot e^{\left(\frac{-E_A}{R \cdot T}\right)} \quad [\text{s}^{-1}]$$

k_0 - präexponentieller Faktor [s⁻¹]

E_A - Aktivierungsenergie [J/mol]

R - universelle Gaskonstante [8.3143 J/(mol K)]

Der präexponentielle Faktor ist der theoretischen Grenzwert der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten bei unendlicher Temperatur. In Abbildung 27 wird die Konvergenz des zweiten Termes $\exp(-E_A/RT) \rightarrow 1$ in Abhängigkeit von der Aktivierungsenergie dargestellt.

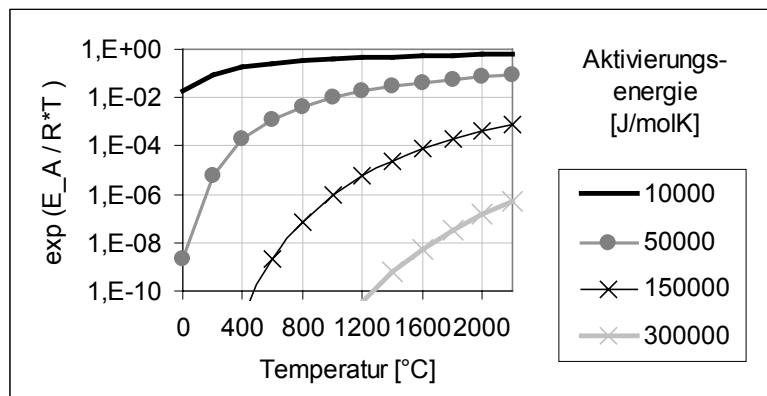


Abbildung 27 Konvergenz des exponentiellen Anteils der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten über der Temperatur bei Variation der Aktivierungsenergie

In Abbildung 28 wird anhand zweier exemplarischer Wertepaare das unterschiedliche Verhalten über der Temperatur deutlich.

Bei einer relativ kleinen Aktivierungsenergie ($E_A=70.000$ J/mol gegenüber $E_A=170.000$ J/mol) nimmt die Reaktion trotz des ebenfalls kleinen präexponentiellen Faktors bereits bei geringen Temperaturen merkliche Werte an. Im folgenden verläuft die Kurve jedoch flacher (A). Bei hohen Temperaturen tritt die Hemmung aufgrund der großen Aktivierungsenergie in Reaktion (B) in den Hintergrund und der größere präexponentielle Faktor ($k_0=1e8$ s⁻¹ gegenüber $k_0=1e4$ s⁻¹) bewirkt eine weitaus stärkere Heftigkeit der Reaktion.

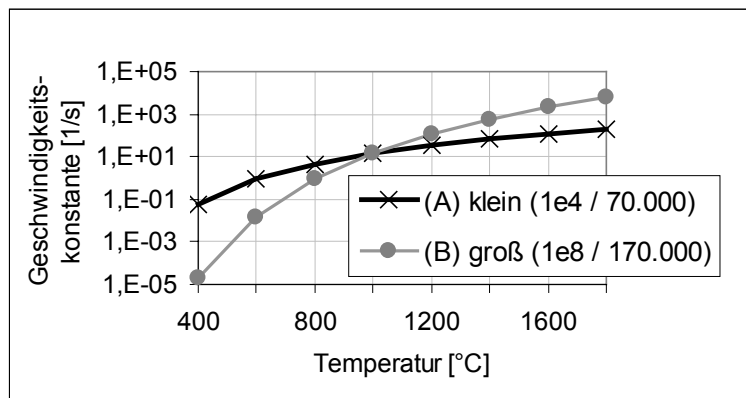


Abbildung 28 Geschwindigkeitskonstanten über der Temperatur bei exemplarischen Kinetikdaten

Der Einfluß der Kinetikparameter erweist sich somit als sehr stark. Schwierig ist jedoch die Recherche zuverlässiger Daten für diese Werte. Insbesondere betrifft dies Sonderreaktionen wie die Teerkrackung, da es sich hierbei nur um einen Modellstoff als Ersatz zur Nachbildung einer Vielzahl von Verbindungen (höheren Kohlenwasserstoffen) handelt. Das macht deutlich, daß sich die Auswertung der Ergebnisse aus der Simulation zum großen Teil auf qualitative Aussagen zu Entstehung und Abbau der am Prozeß beteiligten Stoffe beschränken muß.

Heterogene Reaktionen

Die Reaktion zwischen Feststoff und Gas unterliegt weiteren Abhängigkeiten. Sie errechnet sich im Beispiel der Koksoxidation nach /20/ zu:

$$\dot{r} = \frac{dc_{Koks}}{dt} = -k_{eff} \cdot a \cdot p_{O_2, \infty} \cdot \frac{X_{Koks}}{M_{Koks}} \quad [\text{mol}/(\text{m}^3\text{s})]$$

a - spezifische Oberfläche [$\text{m}^2/\text{m}^3 = \text{m}^{-1}$]

p_i - Partialdruck der reagierenden Spezies [Pa]

k_{eff} - Geschwindigkeitskonstante [$\text{kg}/(\text{m}^2\text{sPa})$]

X_i - Massenanteil in der festen Phase []

M_i - Molmasse der Spezies i [kg/mol]

Die Geschwindigkeitskonstante hatte in der genutzten Literatur die Einheit $[\text{kg}/(\text{m}^2\text{sPa})]$, da sie auf die spezifische Oberfläche und den Partialdruck des gasförmigen Reaktionspartners des Kokes bezogen ist, sowie den Massenabbbrand des Kokes beschreibt. Mit der Korrektur der Oberfläche auf diejenige des Koksanteiles in der Schüttung und durch die Division mit der Molmasse erfolgte die Umrechnung in die im Unterprogramm genutzte Form $[\text{mol}/(\text{m}^3\text{s})]$.

Bei heterogenen Reaktionen ist der Einfluß des Transportes der Reaktanten durch die Grenzschicht des Partikels als ein begrenzender Faktor zu berücksichtigen. Die Limitierung der Reaktionsgeschwindigkeit durch die Hemmung des Transportes tritt bei höheren Temperaturen in den Vordergrund, zuerst der Transport in die Poren und danach der durch die Phasen-Grenzschicht. Bei geringen Temperaturen ist dagegen die endliche chemische Umsatzrate limitierend. Abbildung 29 stellt diesen Zusammenhang durch die logarithmische Aufzeichnung der Geschwindigkeitskonstanten über der reziproken Temperatur (Arrhenius-Diagramm), in den drei Bereichen durch Geraden idealisiert, dar /20/.

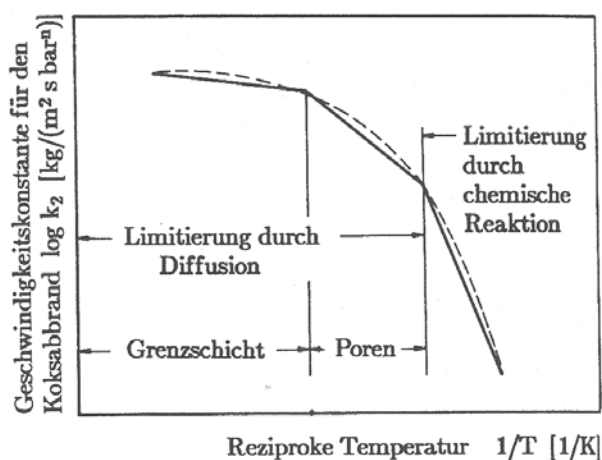


Abbildung 29 Arrheniusdiagramm für den Koksabbbrand

Ein Modell zur Annäherung an diesen Sachverhalt besteht in der Reihenschaltung der zwei grundlegenden Widerstände, Reaktion und Transport, in der Gleichung /20/:

$$\frac{1}{k_{\text{eff}}} = \frac{1}{k_{\text{Reaktion}}} + \frac{1}{k_{\text{Transport}}} \quad [\text{kg}/(\text{m}^2\text{sPa})]$$

Diesen Zusammenhang gibt Abbildung 30 wieder. Auf die zugrundeliegende Berechnung der Transportgeschwindigkeit wird weiter unten eingegangen.

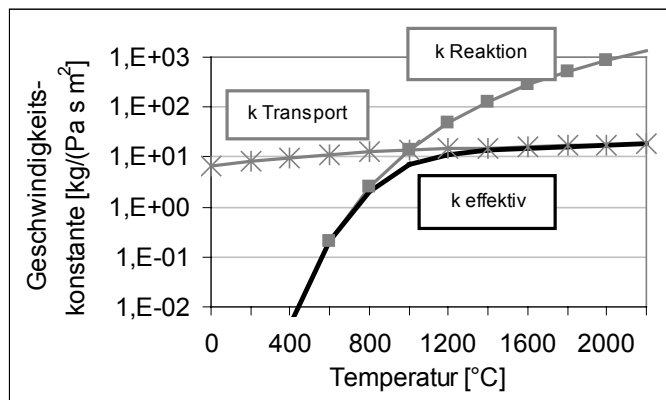


Abbildung 30 Zusammenfassung der Umsatzhemmung durch Reaktion und Transport

Die chemische Reaktion ist im unteren Temperaturbereich gegenüber der Transportgeschwindigkeit sehr langsam und wirkt damit als limitierender Faktor. Im oberen Temperaturbereich wird die effektive Geschwindigkeit durch die nur mäßig ansteigenden Transportgeschwindigkeit im Partikel begrenzt, obwohl sich für die chemische Reaktion um ein vielfaches höhere Geschwindigkeiten errechnen.

Zur direkten Vergleichbarkeit wurde in Abbildung 31 die Darstellungsweise der aus der Literatur [20] entnommenen Abbildung genutzt. Die qualitative Übereinstimmung im Verlauf bestätigt die Anwendbarkeit des Modells zur Nachbildung der Limitierungsmechanismen.

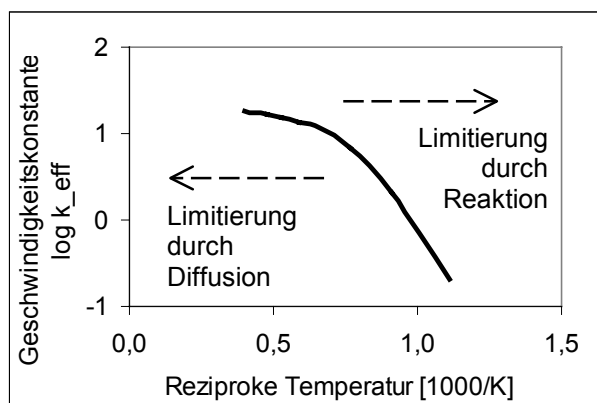


Abbildung 31 Vergleichbare Darstellung der Reaktionshemmung

Folgende Einflußgrößen fließen in die zur Ermittlung der Transportgeschwindigkeit umgestellte Berechnungsformel ein (nach /20/):

$$k_{transport} = \frac{12 \cdot Sh \cdot \delta}{R_i \cdot d_P \cdot T_{GS}} \quad [\text{kg}/(\text{m}^2\text{sPa})]$$

Sh - Sherwood-Zahl []

δ - Diffusionskoeffizient [m²/s]

R_i - spezifische Gaskonstante [J/(kg K)]

d_P - Partikeldurchmesser [m]

T_{GS} - Temperatur Grenzschicht [K]

Auf die Temperaturabhängigkeit der verwendeten Diffusionskoeffizienten wurde bereits eingegangen. Die Temperatur der Grenzschicht T_{GS} wird als arithmetisches Mittel von Partikel und Gasphase vorgeschlagen:

$$T_{GS} = \frac{T_{Gas} + T_{Partikel}}{2} \quad [\text{K}]$$

Die dimensionslose Sherwood-Zahl beträgt nach der Analogie zwischen Wärme- und Stofftransport /57/:

$$Sh = Nu \quad []$$

3.3.3 Berücksichtigung des Chemischen Gleichgewichtes

Bei der Vergasung läuft, im Gegensatz zur Verbrennung, ein Teil der betrachteten Reaktionen nicht vollständig ab. Statt dessen streben diese Reaktionen einen Gleichgewichtszustand zwischen Edukten und Produkten an. Hier laufen Hin- und Rückreaktion zwar noch ab, ihre Beträge sind jedoch gleich groß, der Prozeß scheint nach außen zum Abschluß gekommen zu sein.

Grundlage zur Berechnung ist die temperaturabhängige Gleichgewichtskonstante K_x . Sie gibt das Verhältnis der Volumenanteile von Produkten zu Edukten im Gleichgewichtszustand wieder. Diese sind dazu mit den Stöchiometriekoeffizienten,

d.h. den Molmengen, mit denen die Spezies an der Reaktion teilnehmen, zu potenzieren.

$$K_x = \frac{x_{\text{Produkt}_C}^c \cdot x_{\text{Produkt}_D}^d \cdot \dots}{x_{\text{Edukt}_A}^a \cdot x_{\text{Produkt}_B}^b \cdot \dots} \quad []$$

$$x_i - \text{Volumenanteil der jeweiligen Spezies } i \quad []$$

Die Gleichgewichtskonstante kann aus den aufsummierten Standardbildungsenthalpien und -entropien der Reaktionsteilnehmer und der vorliegenden Temperatur vorausberechnet werden [78]. Je größer dieser Wert ist, um so weiter liegt das Gleichgewicht auf Seiten der Reaktionsprodukte.

$$\ln K = -\frac{\Delta H^+}{R \cdot T} + \frac{\Delta S^+}{R} \quad []$$

$$\Delta H^+ - \text{Standardreaktionenthalpie} \quad [\text{J/mol}]$$

$$\Delta S^+ - \text{Standardreaktionsentropie} \quad [\text{J}/(\text{mol K})]$$

Beispielhaft ist in Abbildung 32 die gegenläufige Entwicklung dieses Wertes über der Temperatur für die Boudouard- und die Wassergasreaktion dargestellt.

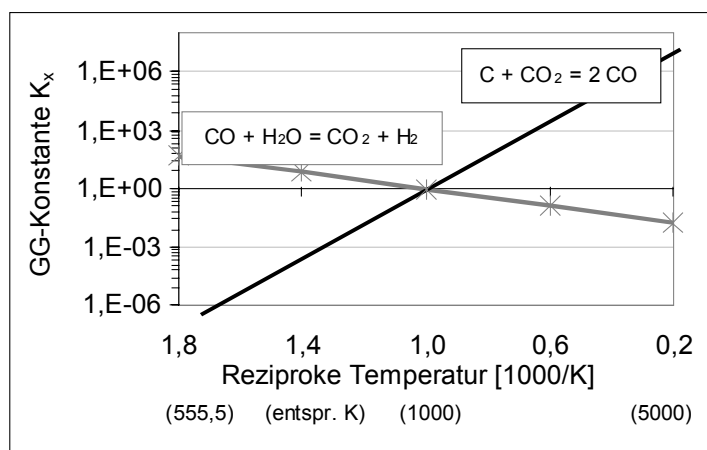


Abbildung 32 Beispiele der Entwicklung von Gleichgewichtskonstanten

In beiden Reaktionen liegt das Gleichgewicht bei niedrigen Temperaturen auf Seiten des Kohlendioxids, welches einmal als Edukt und in der zweitgenannten Reaktion als Produkt vorliegt.

Zur Berücksichtigung dieser Information bei der Berechnung der Reaktionskinetik gibt es verschiedene Ansätze. Beispielsweise kann mit dem Newton-Rapson- oder dem Relaxations-Verfahren die temperaturabhängige Gleichgewichtszusammensetzung des Stoffsystems ermittelt werden. Anschließend wird in der Berechnung der Reaktionsrate statt der aktuellen Konzentration die Differenz zur Gleichgewichtskonzentration (Affinität) eingesetzt. Die numerische Berechnung des Gleichgewichtszustandes in einer jeden Zelle ist jedoch sehr aufwendig. Dies ist bei Black-Box-Betrachtungen und Zonenmodellen mit wenigen Bilanzräumen sinnvoll. Eine weitere Möglichkeit ist die Nutzung der Tatsache, daß die Gleichgewichtskonstante dem negativen Verhältnis der Geschwindigkeitskonstanten von Rück- und Hinreaktion entspricht [21]:

$$K = \frac{k_{hin}}{k_{rück}} \quad []$$

Da die Geschwindigkeitskonstante der Hinreaktion berechenbar ist, kann so auch diejenige der Rückreaktion ermittelt werden. Mit der Differenz der Reaktionsraten als effektive Rate wird die Überlagerung von Hin- und Rückreaktion wiedergegeben.

$$\dot{r}_{eff} = \dot{r}_{hin} - \dot{r}_{rück} \quad [\text{mol/m}^3\text{s}]$$

Für homogene Gleichgewichtsreaktionen wurde, nach Ausklammern der Reaktionskonstanten der Hinreaktion, die Gesamtreaktionsgeschwindigkeit berechnet mit:

$$\dot{r}_{eff} = -k_{hin} \cdot \left(c_{Edukt_A} \cdot c_{Edukt_B} - \frac{1}{K_c} \cdot c_{Produkt_C} \cdot c_{Produkt_D} \right) \quad [\text{mol/m}^3\text{s}]$$

Für heterogene Reaktionen errechnet sie sich analog, bspw. bei der Koksreduktion von Kohlendioxid:

$$\dot{r} = -k_{hin} \cdot a \cdot \left(p_{CO_2} - \frac{1}{K_p} \cdot p_{CO}^2 \right) \cdot \frac{X_{Koks}}{M_{Koks}} \quad [\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})]$$

Durch den Einsatz der dimensionsbehafteten Größen Konzentration c_i bzw. Partialdruck p_i ist die Berechnung der entsprechend ebenfalls dimensionsbehafteten Gleichgewichtskonstanten notwendig. Sie wird ermittelt durch Multiplikation mit der Gesamtmenge, z.B. c_{gesamt} , welche mit der Summe der Stöchiometriekoeffizienten der an der Reaktion beteiligten Gasspezies ($\sum \nu$) zu potenzieren ist. Hierbei zählen Produkte positiv und Edukte negativ:

$$K_c = K_x \cdot (c_{gesamt})^{\sum \nu} \quad [\text{mol}^{\sum \nu}]$$

bzw. im Beispiel der Boudouardreaktion:

$$K_p = \frac{p_{CO_2,eq}^2}{p_{CO,eq}} = K_x \cdot (p_{gesamt})^{\sum \nu} \quad [\text{Pa}^{\sum \nu}]$$

$$\nu - \text{Stöchiometriekoeffizient, hier: } \sum \nu = 1 \quad []$$

3.3.4 Verwendete Spezies, Reaktionen und Kinetikwerte

Aus der Vielzahl von Stoffen und Reaktionen, die zur Nachbildung der Vergasung von Biomassen denkbar sind, wurden die in der Literatur am stärksten diskutierten ausgewählt. Sie sind in Tabelle 15 und Tabelle 16 aufgeführt.

Tabelle 15 Berücksichtigte Spezies

| | ID | Spezies |
|-----------|----|---|
| Feststoff | 0 | trockener Brennstoff |
| | 1 | Brennstoff-Wassergehalt |
| | 2 | Koks (C) |
| Gas | 3 | O ₂ - Sauerstoff |
| | 4 | CO - Kohlenmonoxid |
| | 5 | CO ₂ - Kohlendioxid |
| | 6 | H ₂ - Wasserstoff |
| | 7 | H ₂ O - Wasserdampf |
| | 8 | CH ₄ - Methan |
| | 9 | C _x H _y O _z - Modellteer |

Die Anzahl der Stoffe und Reaktionen wird vor allem durch den zu vertretenden Rechenaufwand (bzw. -zeit) limitiert. Denkbar wäre die Berücksichtigung einer Anzahl höherer Kohlenwasserstoffe und von Reaktionen wie der partielle Oxidation von Teer, Kondensation von Wasserdampf und Flüchtigen oder der Methanisierung.

Tabelle 16 Berücksichtigte Reaktionen

| | ID | Reaktion |
|---------------------------|----|---|
| Feststoffreaktionen | 0 | Trocknung |
| | 1 | Pyrolyse |
| Teer | 2 | Teerkrackung |
| heterogene Oxidation | 3 | $C + O_2 \rightarrow CO_2$ |
| heterogene Gleichgewichte | 4 | $C + CO_2 \rightleftharpoons 2 CO$ |
| | 5 | $C + H_2O \rightleftharpoons CO + H_2$ |
| homogene Oxidationen | 6 | $2 CO + O_2 \rightarrow 2 CO_2$ |
| | 7 | $2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$ |
| | 8 | $CH_4 + 2 O_2 \rightarrow CO_2 + 2 H_2O$ |
| homogene Gleichgewichte | 9 | $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$ |
| | 10 | $CH_4 + H_2O \rightleftharpoons CO + 3 H_2$ |

Trocknung

Bei der Trocknung handelt es sich nicht um eine chemische Reaktion, sondern um eine physikalische Phasenänderung. Sie ist wärmetransportbestimmt.

Die Modellierung der Brennstofftrocknung wird im allgemeinen isotherm bei der Siedetemperatur, z.T. mit einer festgelegten Verteilung um diesen Wert /65/, vorgenommen.

In der vorliegenden Arbeit wurde von einer Trocknung ab der Siedetemperatur bei Standardbedingungen mit einem anschließenden linearen Anstieg ausgegangen, um unter Nutzung eines kinetischen Ansatzes die isotherme Trocknung möglichst nahe nachzubilden.

$$\dot{r}_{Trocknung} = -k_{Trock} \cdot (T - 373,15K) \cdot \frac{X_{Wassergehalt}}{M_{Wassergehalt}} \quad [\text{mol}/(\text{m}^3 \text{ s})]$$

(ab 100 °C)

$$k_{Trock} \text{ - Proportionalitätsfaktor} \quad [\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ sK})]$$

Für den Proportionalitätsfaktor gab ein Wert von 10 [kg/(m³sK)] den Prozeß gut wieder.

Brennstoffpyrolyse und Teerkrackung

Bei der Pyrolyse von Biomassen handelt es sich um eine Fülle von Kompositions- und Dekompositionsreaktionen mit einer Vielzahl von Zwischen- und Endprodukten.

Zur Modellierung sind in der Übersicht /43/ verschiedene Ansätze zu finden. Neben Einschnitt-Modellen finden sich solche mit Parallelreaktionen bis hin zu mehrstufigen Reaktionsabfolgen. An zu modellierenden Produkten werden neben der Spezies Koks im einfachsten Fall nur CO und H₂, darüber hinaus z.T. CO₂, H₂O und CH₄, seltener auch C₂H₄ (Ethen) und Teer verwendet. Teere werden durch nachfolgende Reaktionen mit oder ohne Abspaltung von Koks (Ruß) zu den vorgenannten Gasen umgesetzt.

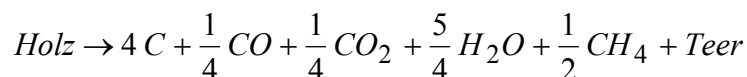
In der vorliegenden Arbeit wurden folgende Vereinfachungen getroffen:

- Endprodukte aus Pyrolyse und anschließender Teerkrackung sind Koks, CO, CO₂, H₂O und CH₄

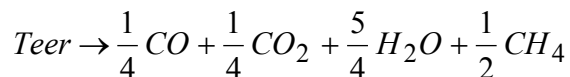
- die Hälfte der gasförmigen Endprodukte ist zunächst im Modellteer gebunden und wird in der Krackung freigesetzt
- sowohl Pyrolyse als auch Teerkrackung haben keine Wärmetönung (Standardreaktionsenthalpie = 0)

Aus diesen Prämissen resultieren bei Einhaltung der Massen-, Elementar- und Energiebilanz zwingend die Molanteile der berücksichtigten Produktspezies. Die Massenbilanz beinhaltet die Festlegung eines sinnvollen Anteiles an Koks. Die Elementarbilanz ist für C, H und O zu führen. Die Erfüllung der Energiebilanz ist durch Aufsummierung und Prüfung der Standardbildungsenthalpien der Spezies sicherzustellen. Die gewählten Modellreaktionsformeln lauteten:

Pyrolyse des getrockneten Brennstoffes



Teerkrackung:



Damit ergaben sich für die Modellstoffe die Eigenschaften nach Tabelle 17:

Tabelle 17 *Eigenschaften Modellholz und Modellteer*

| | | Brennstoff trocken | Teer |
|--------------|----------|----------------------------------|-----------------------------|
| Summenformel | | $\text{C}_6\text{H}_9\text{O}_4$ | $\text{CH}_{4,5}\text{O}_2$ |
| Molare Masse | [g/mol] | 145 | 48,5 |
| Heizwert | [kJ/mol] | 2445 | 462,5 |
| | [MJ/kg] | 16,9 | 9,5 |

Die Produkt-Massenanteile der Modellpyrolyse enthält Tabelle 18:

Tabelle 18 Pyrolyseprodukte nach Modell

| | Koks (C) | CO | CO ₂ | H ₂ O | CH ₄ | Teer |
|----------------|-------------|-----|-----------------|------------------|-----------------|------|
| Anteil [Ma.-%] | 33,1 | 4,8 | 7,6 | 15,5 | 5,5 | 33,4 |

Dabei entfallen etwa ein Drittel der Masse auf den Restkoks, die Hälfte auf Teer und Wasser sowie der Rest auf die Permanentgase. Zum Vergleich wurde einer vorausgegangenen Arbeit /52/ eine Massenbilanz (Abbildung 33) und ein zeitlicher Verlauf in Abhängigkeit von der Temperatur (Abbildung 34) entnommen.

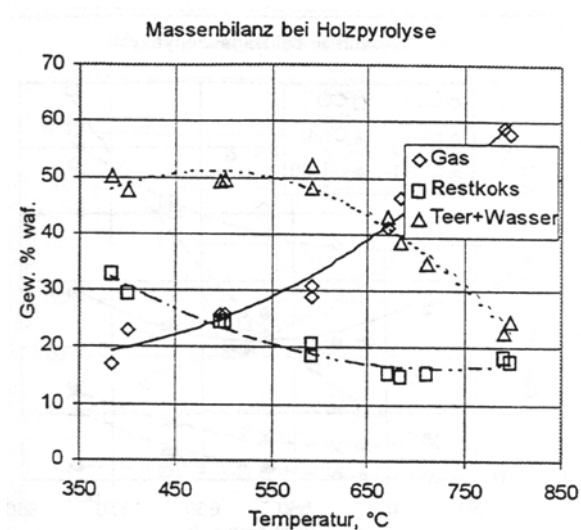


Abbildung 33 Produktzusammensetzung bei der Holzpyrolyse

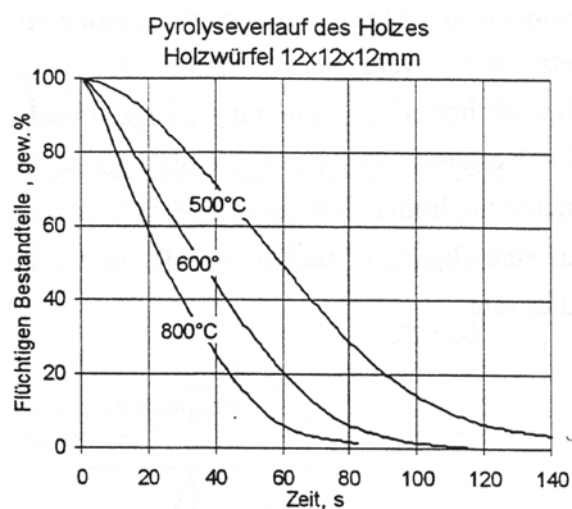


Abbildung 34 Pyrolysevorgang des Holzes

Die angenommene Zusammensetzung entspricht der in Abbildung 33 für niedrige Temperaturen angegebenen. Abbildung 34 zeigt, daß bei ähnlichen Partikelgrößen Entgasungszeiten im Minutenbereich gemessen wurden. Überschlagsrechnungen zu dem untersuchten Vergaser /4/ ergaben für den Aufheizbereich relativ lange Verweilzeiten, bis zur Höhe des Lufteintritts bis zu zwei Stunden. Dies läßt im vorliegenden Fall eine Pyrolyse bei geringen Temperaturen vermuten und bestätigt damit die Sinnhaftigkeit der angenommenen Produktzusammensetzung.

Zur Kinetik von Pyrolyse und Teerkrackung besteht keine gesicherte Datenbasis, die Parameter variieren sehr stark /43/. In der Simulation wurden für die beiden Dekompositionsreaktionen die Werte aus Tabelle 19 ausgewählt /53/, /4/. Eine Betrachtung zum Einfluß der Auswahl findet sich in der Ergebnisdiskussion.

Tabelle 19 Gewählte Kinetikdaten für Pyrolyse und Teerkrackung

| | k_0 präexponentieller Faktor | E_A Aktivierungs- energie |
|---------------|--------------------------------------|-----------------------------------|
| | [s ⁻¹] | [J/mol] |
| Pyrolyse /53/ | 632,86 | 91.530 |
| Krackung /4/ | 10 ¹⁰ | 165.000 |

Der Umsatz wurde für die Edukte jeweils als Reaktion erster Ordnung angenommen.

Koksumsatz (heterogene Reaktionen)

Für die Berechnung des Geschwindigkeitsterms der chemischen Reaktion wurden die Kinetikwerte nach Tabelle 20 verwendet /20/, /68/. In den grundlegenden Abschnitten wurde bereits die Berechnung der effektiven Reaktionsgeschwindigkeit aus Transport- und Chemielimitierung erläutert.

Für Kokspartikel mit einem Durchmesser $d_p > 1$ mm kann nach /20/ im gesamten interessierenden Temperaturbereich von einer Totaloxidation mit Sauerstoff ausgegangen werden. Dies wird damit begründet, daß der Weg durch die Partikelgrenzschicht eine genügende Verweilzeit sicherstellt, um an der Kornoberfläche gebildetes CO aufzuoxidierten. Daher wurde auf die Integration der Teiloxidation $2C + O_2 \rightarrow 2CO$ verzichtet.

Tabelle 20 Kinetikwerte zum Koksumsatz

| | k_0 präexponentieller Faktor | E_A Aktivierungs- energie |
|----------------------|--------------------------------------|-----------------------------------|
| | [kg/m ² sPa] | [J/mol] |
| C + O ₂ | 204 | 75000 |
| C + CO ₂ | 250 | 145000 |
| C + H ₂ O | 410 | 146000 |

Homogene Reaktionen

Für die drei homogenen Oxidationsreaktionen wurden nach /20/ folgende Kinetikmodelle implementiert.

Oxidation von CO:

$$\dot{r} = -10^{14} \cdot e^{\left(\frac{-20.000}{T}\right)} \cdot c_{CO} \cdot c_{O_2}^{0,25} \cdot c_{H_2O}^{0,5} \quad [\text{mol}/(\text{cm}^3 \text{ s})]$$

Oxidation von H₂:

$$\dot{r} = -10^{14} \cdot e^{\left(\frac{-20.500}{T}\right)} \cdot c_{H_2} \cdot c_{O_2}^{1,42} \quad [\text{mol}/(\text{cm}^3 \text{ s})]$$

Oxidation von CH₄:

$$\dot{r} = -10^{13} \cdot e^{\left(\frac{-24.000}{T}\right)} \cdot c_{CH_4}^{0,7} \cdot c_{O_2}^{0,8} \quad [\text{mol}/(\text{cm}^3 \text{ s})]$$

Die homogenen Gleichgewichtsreaktionen wurden nach /65/ mit einer Aktivierungsenergie von $E_A = 100.000 \text{ J/molK}$ belegt. Werte für den präexponentiellen Faktor von $k_0 = 1,4\text{e4}$ (Wassergasgleichgewicht) bzw. $k_0 = 1,4\text{e6}$ (Methanreformierung) bildeten den Prozeß gut ab.

4 ERGEBNISSE UND DISKUSSION

Mit der Darstellung der Ergebnisse aus Experiment und mathematischer Modellierung sollen die Transparenz des Prozesses erarbeitet sowie die Potenzen und die Zuverlässigkeit der erarbeiteten Simulationsmethode überprüft werden.

4.1 Entwicklung der Gaseigenschaften im Reaktor

4.1.1 Erläuterung der Darstellungsweise

Die Darstellung der Ergebnisse erfolgte für jede der vier Meßebenen in einem Einzeldiagramm. Die Meßebenen befanden sich im unteren Oxidations- und Reduktionsbereich des Vergasers, vom Lufteintritt (1) abwärts zum Boden (2 bis 4).

Innerhalb der Einzeldiagramme wurden die Werte aus den jeweils vier radialen Meßstellen wiedergegeben. Sie sind zur Verdeutlichung der Schwankungsbreite in einer Punktwolke pro Meßort dargestellt. Die Mittelwerte der Messungen finden sich in einer Linie wieder. Eine zweite Linie zeigt die Rechenergebnisse. Damit ist ein direkter Vergleich zwischen Messung und Rechnung gegeben.

Über der Sekundärachse erfolgte die Auftragung der relativen Schwankungsbreite (Variationskoeffizient). Dazu wurde die Standardabweichung der Meßgröße auf den Mittelwert bezogen $/14/$.

Zusätzlich wurde der errechnete Gesamtverlauf beigelegt. Dadurch wird die punktuellen Darstellungen im Diagramm durch ein stärker aufgelöstes Bild des gesamten Reaktors ergänzt. Dies geschah zum besseren Verständnis durch Spiegelung an der Mittelachse. Es sei noch einmal erwähnt, daß die Basis hierfür die Berechnung des zweidimensionalen Feldes eines radialen Schnittes und die Annahme von Rotationssymmetrie war.

4.1.2 Berechnete Strömungsgeschwindigkeit und Betrachtungen zum Strömungswiderstand

Eine Grundlage zum Verständnis der Ergebnisse ist das zugrundeliegende Strömungsverhalten. Daher wurde in Abbildung 35 das berechnete Geschwindigkeitsfeld der Gasströmung vorangestellt und um eine vektorielle Darstellung ergänzt.

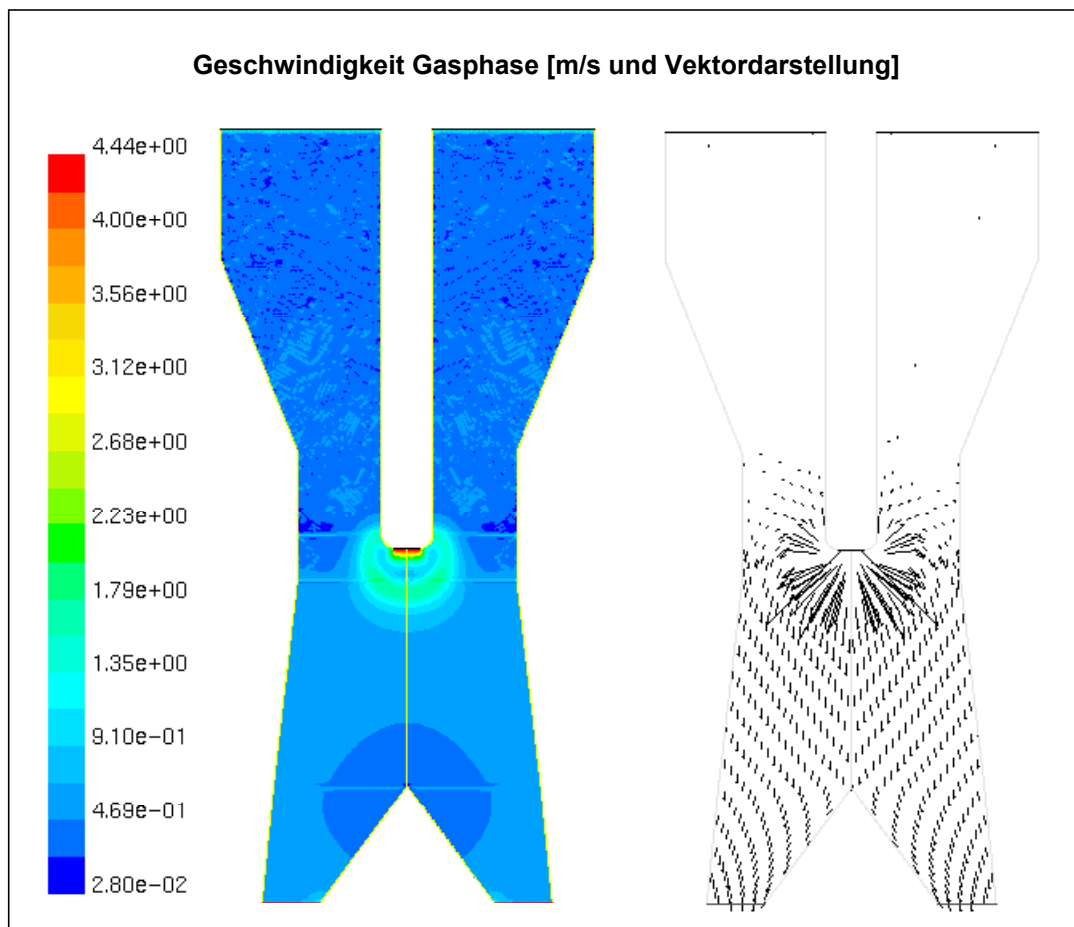


Abbildung 35 Gasströmung

Die Unstetigkeiten im Geschwindigkeitsprofil sind auf Instabilitäten in der numerischen Berechnung an den Orten mit sehr geringen Strömungsgeschwindigkeiten zurückzuführen.

Nach den Ergebnissen nimmt die Geschwindigkeit von oben nach unten, mit zwei lokalen Maxima, zu. Die wesentlichen Ursachen hierzu sind:

- Zuströmung des Vergasungsmittels etwa in Reaktormitte aus der zentralen Luftlanze
- Umsatz des Feststoffes in gasförmige Produkte
- Dichteverminderung aufgrund steigender Temperaturen und damit Zunahme des spezifischen Volumens
- die Reaktorgeometrie (Verengungen in Höhe des Lufteintrittes und am Austritt)

Bedeutsam ist das Strömungsverhalten um den Einstrombereich an der Spitze der Luftlanze. Die Gasströmung wird schnell abgebremst. Dies wird begleitet von einer in alle Richtungen strebenden Verbreiterung der Strömung. Dem schließt sich am Höhepunkt der Oxidationsreaktion durch die temperaturbedingte

Dichteverminderung und die starke Gasproduktion noch einmal ein lokales Maximum an. Sehr schnell nimmt das zugeströmte Gas dann die Gesamtströmungsrichtung an. Die von oben herabdrängenden Pyrolysegase werden dagegen zur Wand hin abgelenkt.

Auf das Ergebnis der Rechnung haben das verwendete Modell zur Berücksichtigung des Strömungswiderstandes und die darin eingesetzten Parameter einen hohen Einfluß. Dies soll anhand eines Vergleiches bei Variation des Strömungswiderstandes illustriert werden (Abbildung 36). Es handelt sich jeweils um einen Ausschnitt am Lufteintritt von der Symmetrieachse des Vergasers zur Wand. Dabei wies die Modellierung der ursprünglichen Lanze mit seitlichem Luftaustritt die anschaulichsten Ergebnisse auf.

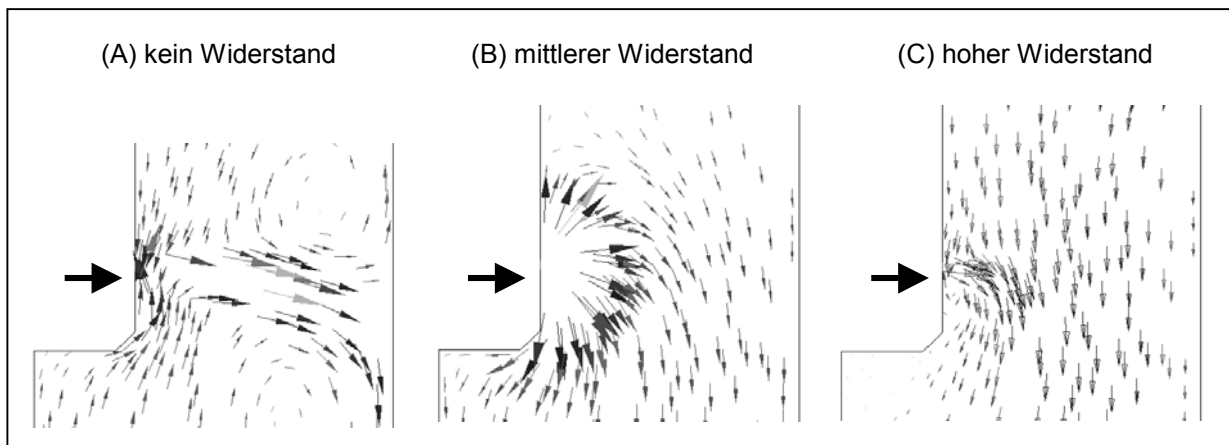


Abbildung 36 Variation Strömungswiderstand

Im linken Bild (A) wurde kein von der Schüttung verursachter Strömungswiderstand implementiert. Das zuströmende Gas durchdringt als Freistrahle ungehindert den Reaktionsraum bis zur Wand und induziert dabei Wirbel und ausladende Rückströmungen.

Mit zunehmenden Strömungswiderstand (B), (C) wird dieses Verhalten vermindert. Die Vektordarstellung verdeutlicht gut die angesprochene und hier zunehmend stärkere Verzögerung und Ablenkung der Strömung.

4.1.3 Entwicklung der Sauerstoffkonzentration

Die Oxidationsreaktionen mit Luftsauerstoff setzen die für den Gesamtprozeß der Vergasung benötigte Energie frei. Das geschieht, wie die Strömungsberechnung zeigt, im wesentlichen durch den Abbrand von Koks, da die brennbaren Gase von der Luftzufuhr abgedrängt werden. Die Koksoxidation wird mit der berechneten

Intensität in Abbildung 37 dargestellt. Die sich anschließenden Reduktionsreaktionen produzieren das gewünschte Brenngas.

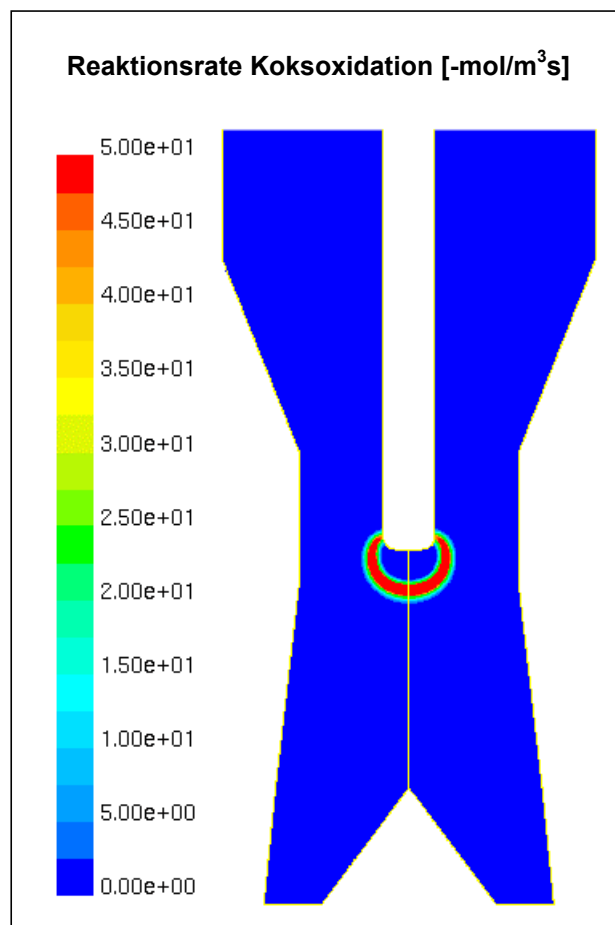


Abbildung 37 Reaktionsrate Koksoxidation

Nach dem Eintritt der Luft in den Reaktionsraum wird diese zunächst aufgeheizt. Dem schließt sich die Reaktionszone an. Der Höhepunkt der Reaktionsrate wird dabei schnell erreicht. Anschließend bringt der Mangel an Sauerstoff die Reaktion wieder zum Erliegen.

Der aus dieser Reaktion resultierende Verlauf des Sauerstoffs wird durch dessen Volumenanteil in Abbildung 38 dargestellt. Es wird ein schneller radialer und axialer Abbrand von Sauerstoff deutlich. Nach dem Ausgangswert (Sauerstoffgehalt in Luft: 20,9 Vol.-%) fallen die gemessenen Werte bereits sehr nahe der Luftzufuhr (1-Mitte) im Mittel auf 7,9 Vol.-%. Dem folgen am nächstgelegenen Punkt der Meßebeine 3,2 Vol.-%. Durch den rapiden radialen Abfall des Sauerstoffgehaltes im Gas steht dieser an den Seiten, d.h. in wandnahen Gebieten, zum Umsatz von Pyrolyseprodukten, etwa zur Oxidation von höheren Kohlenwasserstoffen nur noch in sehr begrenztem Umfang zur Verfügung. In der tiefergelegenen Meßebenen (2-4)

ist Sauerstoff praktisch vollständig umgesetzt. Die vereinzelt gemessenen hohen Werte nahe der Wand lassen darauf schließen, daß es nicht gelungen ist, die Sonde vollständig gegen den Meßflansch abzudichten.

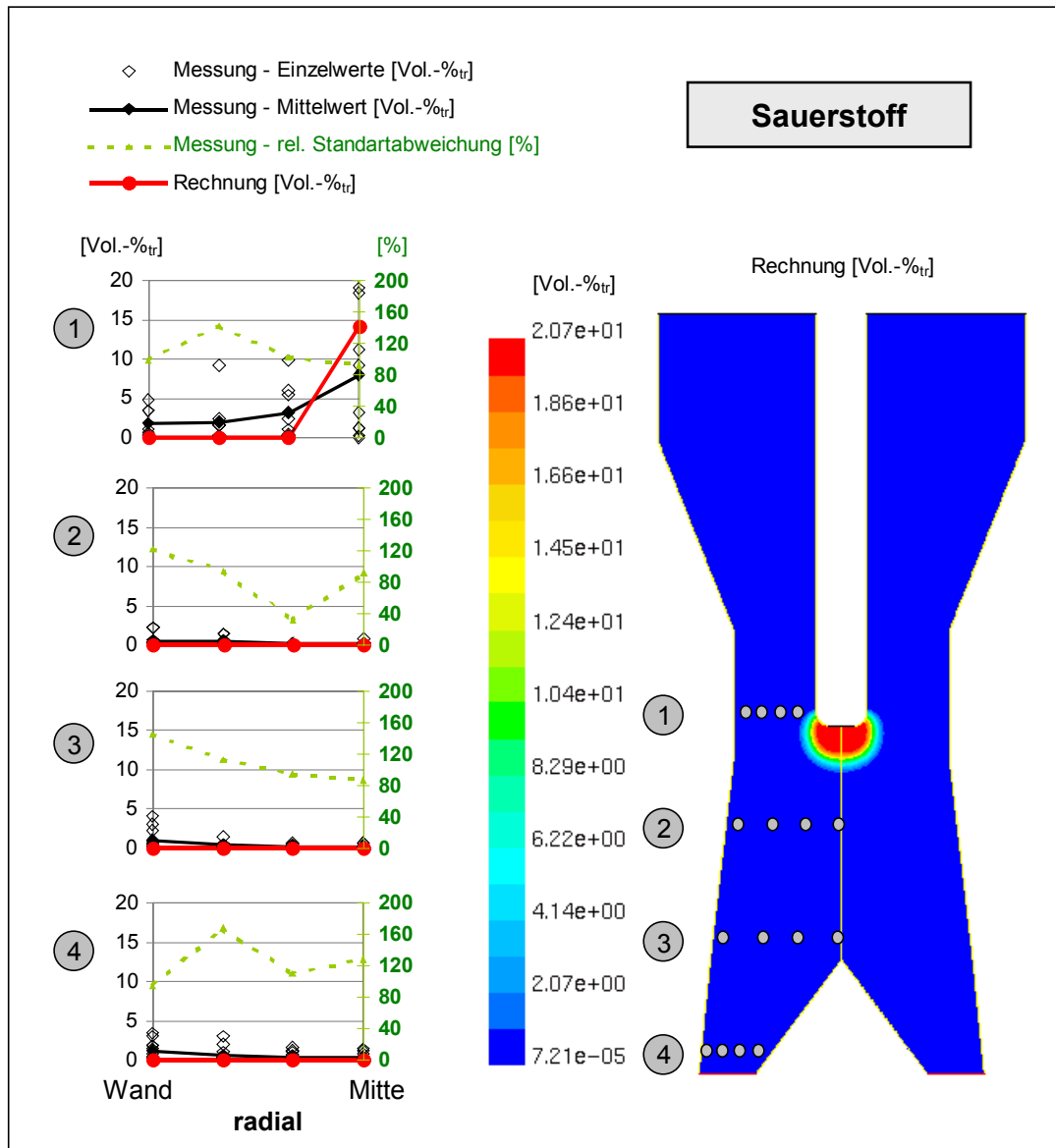


Abbildung 38 Entwicklung Sauerstoffgehalt

Über alle Meßebenen hinweg ergab sich eine hohe Schwankungsbreite der Meßwerte mit einer relativen Standardabweichung in der Größenordnung von 100 %. In der obersten Meßebene ist dies nach Meinung des Bearbeiters auf Brückenbildungen zurückzuführen. Da sich kurz oberhalb eine Einschnürung der Reaktorgeometrie befindet, war dafür eine erhöhte Wahrscheinlichkeit gegeben. In diesem Fall können Teile der eintretenden Luft durch Verwirbelungen bis zum Rand gelangen und dort detektiert werden. In den unteren Meßebenen ergeben sich die

hohen Werte der relativen Standardabweichung aufgrund des kleinen Absolutwertes der gemittelten Messung.

Die Berechnung unterstellt offensichtlich höhere Reaktionsraten des Sauerstoffumsatzes. Die Spezies erreicht nur den zur Luftzufuhr nächstgelegenen als Meßpunkt definierten Ort.

4.1.4 Temperaturverteilung und Diskussion des Wärmetransportes

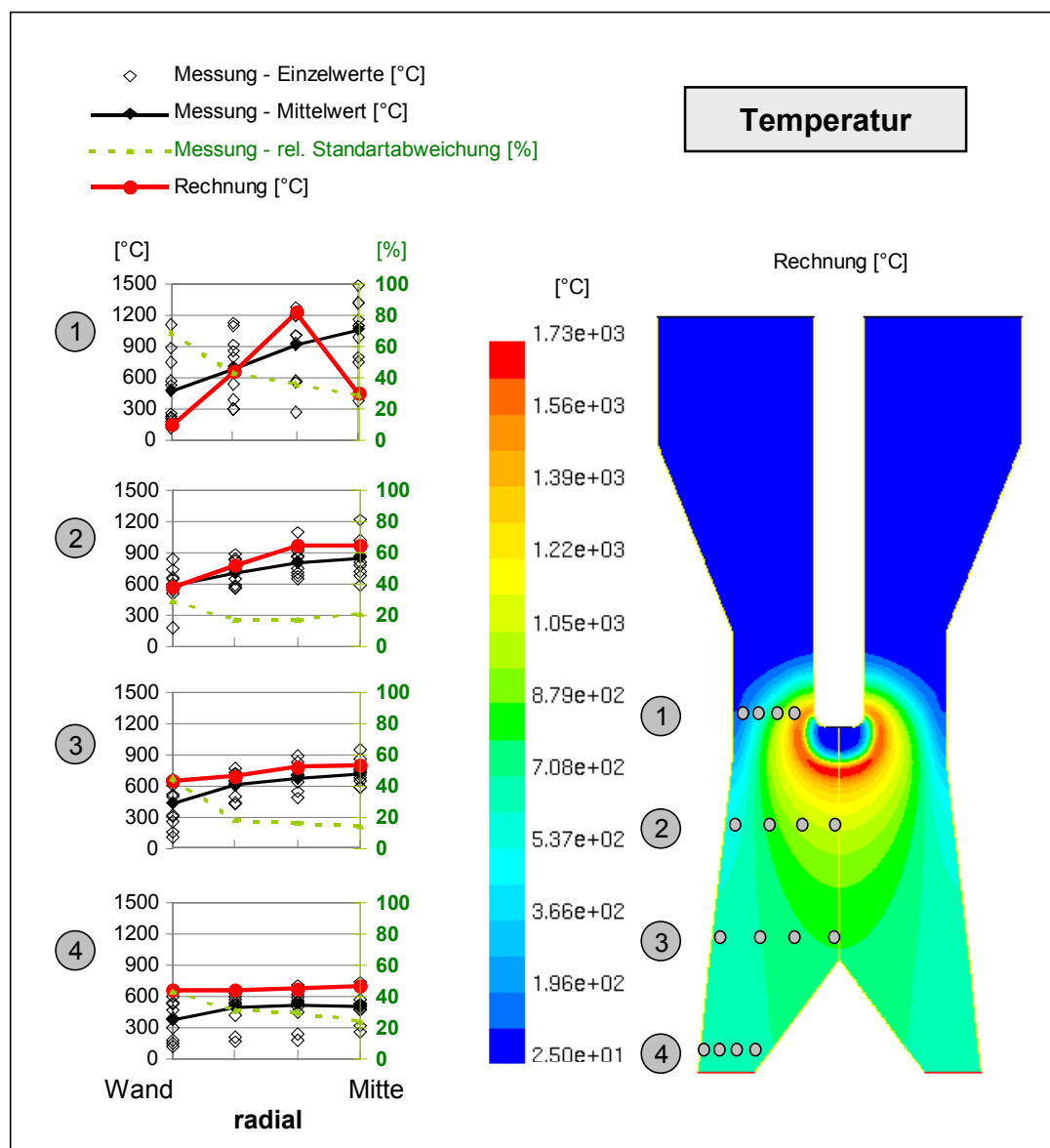


Abbildung 39 Entwicklung Temperatur

Abbildung 39 zeigt die Entwicklung der Temperatur im untersuchten Prozeß.

Die stark exotherme Oxidationsreaktion schlägt sich deutlich in der Temperatur nieder. Die Mittelwerte der Meßpunkte steigen in der ersten Ebene von 476 °C am Rand auf 1067 °C nahe dem Lufteintritt. Der höchste in die Auswertung

eingeflossene Wert lag am letztgenannten Ort bei 1484 °C. Erwähnt seien Einzelmessungen mit einem Hochtemperatur-Thermoelement, bei denen kurzzeitig Werte bis 1800 °C aufgenommen wurden.

Ein schneller Sauerstoffabbrand resultiert in einem großen Temperaturgradienten, während geringere Reaktionsintensitäten die Temperaturspitzen glätten. Um diesen Bezug zu verdeutlichen, seien zwei exemplarische Wertepaare von Einzelmessungen für den zum Lufteintritt nächsten Meßort (1-Mitte) genannt. Gleichzeitig mit einer Sauerstoffkonzentration von 1,22 Vol.-% wurde dort eine Temperatur von 1323 °C gemessen, bei 19,0 Vol.-% dagegen 380 °C.

Die sehr geringe mittlere Temperatur von 476 °C am Rand der ersten Meßebeine reicht zum vollständigen Umsatz der dort auftretenden höheren Kohlenwasserstoffe nicht aus. Zum Austritt des Vergasers hin fällt die Temperatur ab. Dabei ist eine radiale Vergleichmäßigung zu erkennen, welche im folgenden noch Gegenstand der Diskussion sein wird.

Die berechnete Höchsttemperatur liegt mit 1730 °C oberhalb der im Mittel gemessenen, allerdings an einem eng begrenzten Punkt zwischen der ersten und zweiten Meßebeine. Im Vergleich zu den gemessenen Werten ist zu beachten, daß es sich aufgrund der Absaugung nicht um eine punktgenaue Messung, sondern um einen Mittelwert des Absauggebietes handelt. Im unteren Teil kommt die Vereinfachung des adiabaten angenommenen Reaktors zum Tragen. Die Temperatur bleibt infolge der zum Erliegen gekommenen Reduktionsreaktionen oberhalb 600 °C, während die Meßwerte aufgrund konstruktionsbedingter Wärmeabfuhr weiter absinken.

Für die Maximaltemperatur in einem Festbettvergaser finden sich in der Literatur sehr unterschiedliche Meinungen wieder. Die Annahmen reichen von >1200 °C /41/, bis zu 2400 °C in Angaben von Herstellern /33/.

Dieser Wert soll daher im folgenden näher erörtert werden. Tabelle 21 gibt hierzu Eckwerte wieder.

Tabelle 21 Eckwerte zur Temperatur

| | Temperatur °C |
|--|-------------------------------------|
| Maximalwert Messung | ca. 1800 |
| Schmelzverhalten der Asche | > 1180 (Beginn) > 1260 (Fließen) |
| Metallschmelzanalysen /4/ | 1370 ... 1410 |
| adiabate Verbrennungs- temperatur Holz /67/ | ca. 1700 |
| adiabate Verbrennungs- temperatur Koks /20/ | ca. 2100 |

An der TU Dresden wurden, wie bereits erwähnt, insbesondere in instationären Zuständen, Werte um 1800 °C gemessen.

Werte um 1200 ... 1400 °C wurden durch Analysen an Schlacken und Metallteilen untermauert. Abbildung 40 zeigt die Wirkung an den Düsenköpfen der Luftlanze.

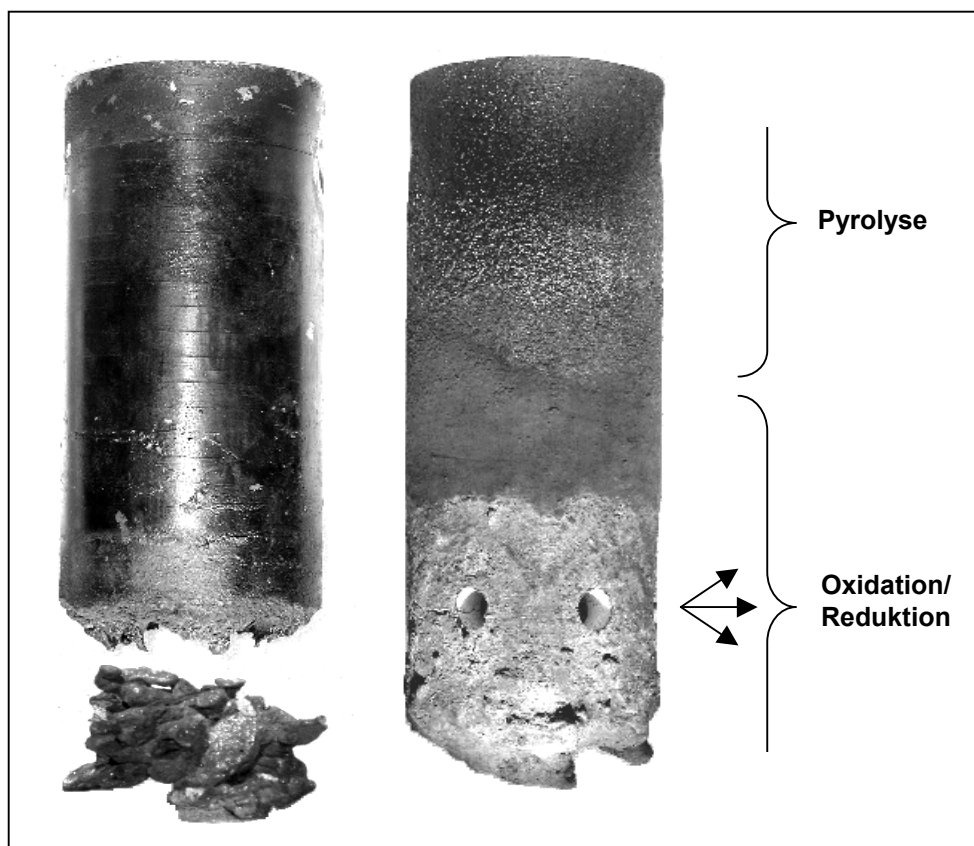


Abbildung 40 Luftlanzen-Endstücke

Dabei handelt es sich um in der ursprünglichen Geometrie gefertigte Ausführungen mit seitlichem Luftaustritt. Auf der linken Seite zeigt das Foto ein aufgrund thermischer Überlastung zerstörtes metallisches Endstück mit in der Asche gefundenen geschmolzenen Metallresten. Die rechte Lanze ist eine daraufhin gefertigte keramische Ausführung, die an der Oberfläche Spuren der einzelnen Prozeßschritte aufweist. Im oberen Teil fanden sich teerige Reste der Pyrolyse. Darauf folgten trockene Rußablagerungen, die auf eine reduzierende Atmosphäre schließen lassen. Nahe der Luftzufuhr waren dagegen Asche- und Schlackeablagerungen zu finden, die auf Temperaturen oberhalb 1260 °C hinwiesen. Die abgebildete Ausführung mußte aufgrund von Spannungsspitzen an den Luftaustrittslöchern abgeändert werden. Sowohl im Experiment als auch in der Berechnung wurde dann mit einer einfachen axialen Ausströmung gearbeitet.

Die adiabate Verbrennungstemperatur von Holz bewegt sich nach /67/ und eigenen Berechnungen bei ca. 1700 °C. Bei diesem charakteristischen Wert handelt es sich um die Temperatur der Produkte bei vollständigem Umsatz des Brennstoffes ohne Luftüberschuß (Luftzahl $\lambda=1$) und ohne Wärmeverlust.

In Vergasern der untersuchten Art herrschen Verhältnisse, die sehr hohe Temperaturspitzen zulassen. Die nach Meinung des Bearbeiters zu erwartenden Reaktionsbedingungen in der Hochtemperaturzone sind in Abbildung 41 dargestellt.

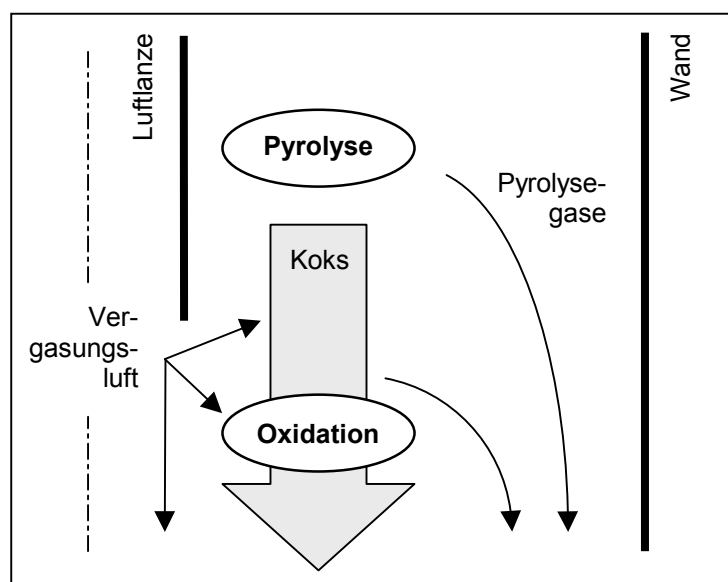


Abbildung 41 Oxidationsbedingungen (Ausschnitt)

Es sind zwischen Luftlanze (links) und Reaktorwand (rechts) die vom Autor postulierten Strömungsrichtungen von Gas und Feststoff illustriert. Demnach trifft in der Oxidationszone nicht der Brennstoff Holz, sondern Koks aus der weiter oben stattgefundenen Pyrolyse auf die Vergasungsluft. Dabei ist nach /20/ mit einer adiabaten Verbrennungstemperatur von 2100 °C zu rechnen. Beide Ströme können zudem eine Vorwärmung erfahren haben.

Dieses Strömungsverhalten bedeutet für die Luftzahl ein Durchlaufen ihres Betrages von Unendlich (entspricht den Bedingungen am Lufteintritt) bis 0,5 als eine durch die Stöchiometrie vorgegebene Grenze. Diese Entwicklung wird in Abbildung 42 von rechts nach links nachempfunden. Es handelt sich mit der Vergasung von Kohlenstoff unter adiabaten Bedingungen um eine Grenzfallbetrachtung. Asche wurde aufgrund der untergeordneten Rolle beim Brennstoff Holz nicht bilanziert. In einer Tabellenkalkulation wurden die resultierenden Gaskonzentrationen, sowie die sich aus der Energiebilanz (unter Berücksichtigung temperaturabhängiger spezifischer Wärmekapazitäten) ergebenden Temperaturen ermittelt.

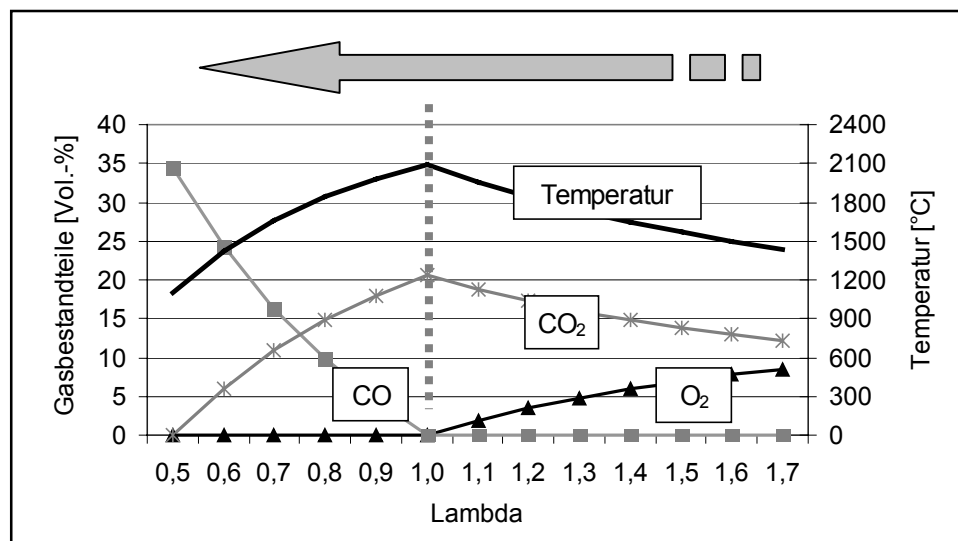


Abbildung 42 Auswirkung der Luftzahl auf Temperatur und Gaszusammensetzung (Brennstoff Koks)

Erwartungsgemäß wird bei $\Lambda = 1$ (alle chemische Energie des Brennstoffes ist freigesetzt und als fühlbare Wärme der Gase vorhanden) die höchste Temperatur erreicht. Sie deckt sich mit dem Wert aus der Literatur /20/. Bei höheren Luftzahlen senken überschüssiger Sauerstoff und entsprechend zusätzlicher Luftstickstoff mit ihren Wärmekapazitäten die Temperatur, der Anteil am Verbrennungsprodukt

Kohlendioxid fällt asymptotisch. Bei kleineren Luftzahlen ($\lambda < 1$) ist die Energie teilweise chemisch im Kohlenmonoxid gebunden und steht nicht als fühlbare Wärme zur Verfügung. Der Kohlendioxidanteil strebt gegen Null, die Vergasungsendtemperatur läge bei etwa 1100 °C.

Folgende Effekte wirken dem entgegen und begrenzen die Maximaltemperatur:

- Wärmeverlust (Strahlung, Leitung) aus der Hochtemperatur-Zone aufgrund hoher Gradienten
- unvollständige Oxidation, parallel laufen bereits Reduktionsreaktionen
- die in die Oxidationszone strömenden Partikel sind noch nicht vollständig pyrolysiert, damit befinden sich in dieser Zone weitere Gase wie Wasserdampf und Methan, wodurch zusätzliche, auch endotherme, Reaktionen auftreten
- durch Brückenbildung können größere Gasräume entstehen, welche eine Vergleichmäßigung durch intensive Vermischung verursachen

Der Einfluß der Wärmeleitung wird in Abbildung 43 deutlich.

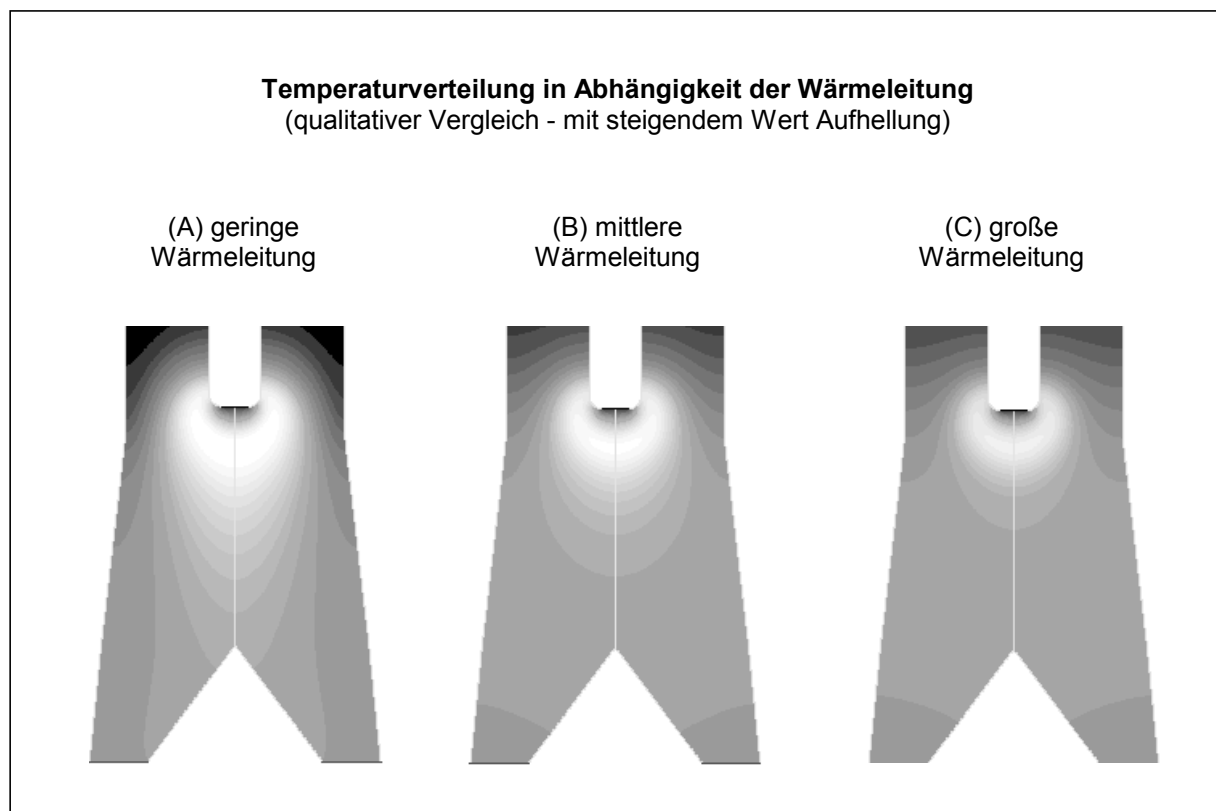


Abbildung 43 Bedeutung der Wärmeleitung in der Schüttung

Mit den Möglichkeiten der mathematischen Simulation zeigt sich in einem Ausschnitt des unteren Reaktorteils durch Variation des Wärmeleitkoeffizienten dessen Einfluß auf den Temperaturverlaufes. Hierzu war die Vorgabe einer minimalen Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten der Koksoxidation nötig, denn bei Beibehaltung der Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten würde bei geringer Wärmeleitung (λ) mangels rückwirkender Aktivierungsenergie die Reaktionsfront aus dem Reaktor heraus getragen.

In Falle einer relativ gut isolierenden Schüttung (λ) wird bei sonst gleichen Reaktionsbedingungen erwartungsgemäß die höchste Temperatur erreicht. Des weiteren zieht sich die Hochtemperaturzone aufgrund geringer Ableitung weit nach unten. Mit zunehmender Wärmeleitung (nach rechts) nimmt der Wert der Maximaltemperatur ab, da die Energie stärker in kühlere Gebiete abgeleitet wird. Es kommt zu einer schnelleren Vergleichmäßigung auf einen mittleren Wert.

4.1.5 Auftreten von Kohlenmonoxid

Kohlenmonoxid stellt aufgrund der in ihm gespeicherten Brennstoffenthalpie eine Zielkomponente der Vergasung dar. Den gemessenen und errechneten Verlauf gibt Abbildung 44 wieder. Als maximalen Mittelwert an Kohlenmonoxid wurden in der zweiten Meßebe (1-Mitte) 29,5 Vol.-%_{tr} ermittelt. Einzelmessungen ergaben Werte bis 33,6 Vol.-%_{tr}. Diese Zahlen stützen den weiter oben diskutierten Gedanken, nach dem in einer ersten separaten Vergasungszone der Luftsauerstoff mit Koks bei hohen Temperaturen im wesentlichen zu Kohlenmonoxid reagiert. Der dort angegebene Grenzwert von maximal 34,4 Vol.-% wurde nahezu erreicht.

Auch hier ist in der ersten Meßebe aus den genannten Gründen, wie Vermischung aufgrund Brückenbildungen und Inhomogenitäten im Brennstoff, eine hohe Schwankungsbreite festzuhalten. Im Verlauf (Ebene 1 => 4) kommt es wieder zu einer Vergleichmäßigung, während der sich die Endkonzentration einstellt.

Zwischen den Mittelwerten der Meßergebnisse und den errechneten Werten kann sowohl qualitativ als auch quantitativ eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt werden. Die mathematische Simulation lieferte einen Maximalwert von etwa 31 Vol.-%. Dieser lag in der Mitte des Reaktors, nach dem errechneten, und sich kurz unterhalb des Lufteintrittes befindenden, Temperaturmaximum. Diese Lage ist darin begründet, daß die endothermen Reduktionsreaktionen zur Kohlenmonoxidproduktion die Temperatur wieder herabsetzten.

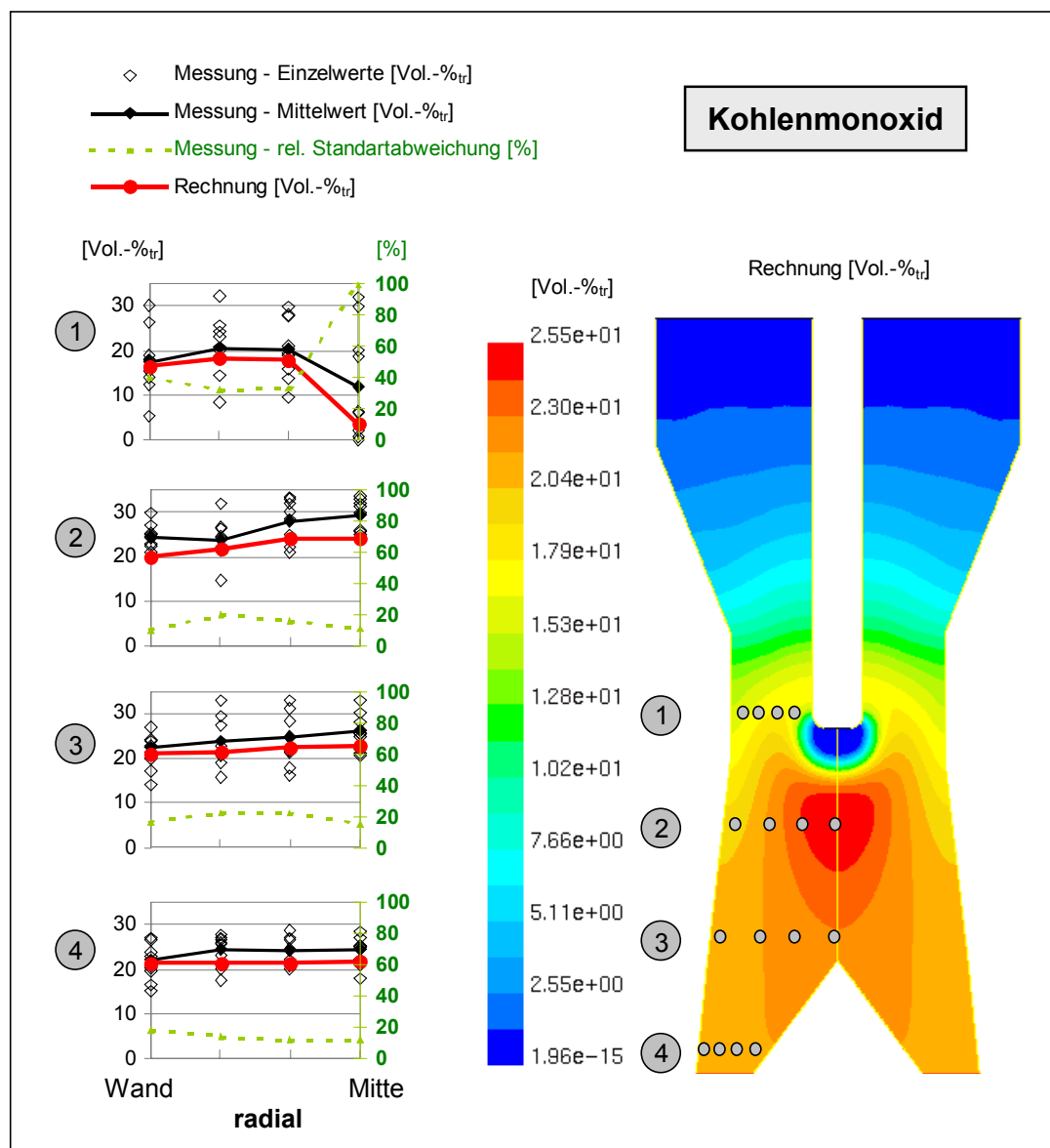


Abbildung 44 Entwicklung Kohlenmonoxid

4.1.6 Verteilung von Wasserdampf im Reaktor

Die Komponente Wasserdampf konnte mit den zur Verfügung stehenden Meßapparaturen nicht analysiert werden. Daher finden sich in Abbildung 45 allein Rechenergebnisse. Die berechnete Entwicklung des Wasserdampfes wird mit der Reaktionsrate der Hinreaktion der homogenen Wassergasreaktion ergänzt, bei der Wasserdampf mit Kohlenmonoxid zu Wasserstoff und Kohlendioxid umgesetzt wird. Diese Gleichgewichtsreaktion ist aufgrund der Beteiligung der vier wichtigsten reagierenden Gasbestandteile von wesentlicher Bedeutung für die Einstellung der Zusammensetzung des Gases bis zum Austritt.

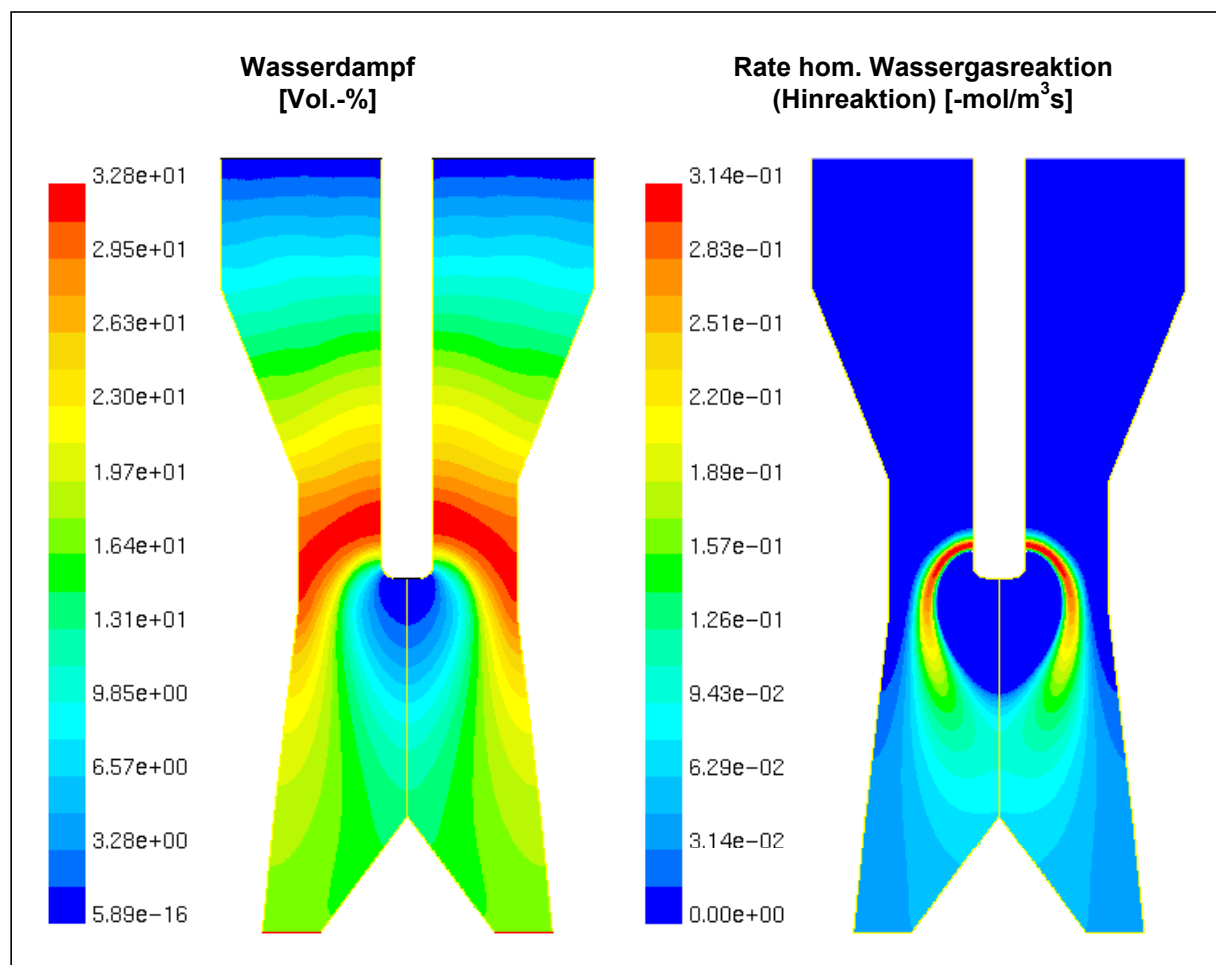


Abbildung 45 Entwicklung Wasserdampf und Reaktionsrate der homogenen Wassergasreaktion

Wasserdampf ist ein Produkt aus der Trocknung und der Pyrolyse. Dementsprechend finden sich an den Orten dieser Reaktionen, kurz oberhalb der Hochtemperaturzone, die höchsten Konzentrationen dieser Spezies. Im Gebiet der Luftzufuhr ist dagegen eine Verdrängung von Wasserdampf erkennbar. Bis zum Reaktoraustritt hat sich die Konzentration an Wasserdampf radial vergleichmäßigt. Die axialen Konzentrationsgradienten verringern sich ebenfalls deutlich.

Wie die dargestellte Reaktionsrate zeigt, kommt es besonders im Grenzbereich zwischen der äußeren Wasserdampfströmung und der im vorigen Abschnitt diskutierten inneren Kohlenmonoxidströmung zur intensiven Reaktion unter Anstreben des Gleichgewichtszustandes. Somit kann diese Reaktion im Zentrum des Reaktors im wesentlichen als mischungslimitiert angesehen werden. Danach verringert sich die Reaktionsgeschwindigkeit zum Ausgang hin merklich. Die Reaktion ist jedoch noch nicht vollständig abgeschlossen.

4.1.7 Konzentration von Wasserstoff

Wasserstoff wird während der Pyrolyse sowie bei der homogenen und der heterogenen Wassergasreaktion freigesetzt. Als Produkt der genannten beiden Wassergasreaktionen entsteht Wasserstoff an Orten, an denen der Ausgangsstoff Wasserdampf und dessen Reaktionspartner Koks bzw. Kohlenmonoxid vorhanden sind und begünstigende Temperaturen herrschen (Abbildung 46).

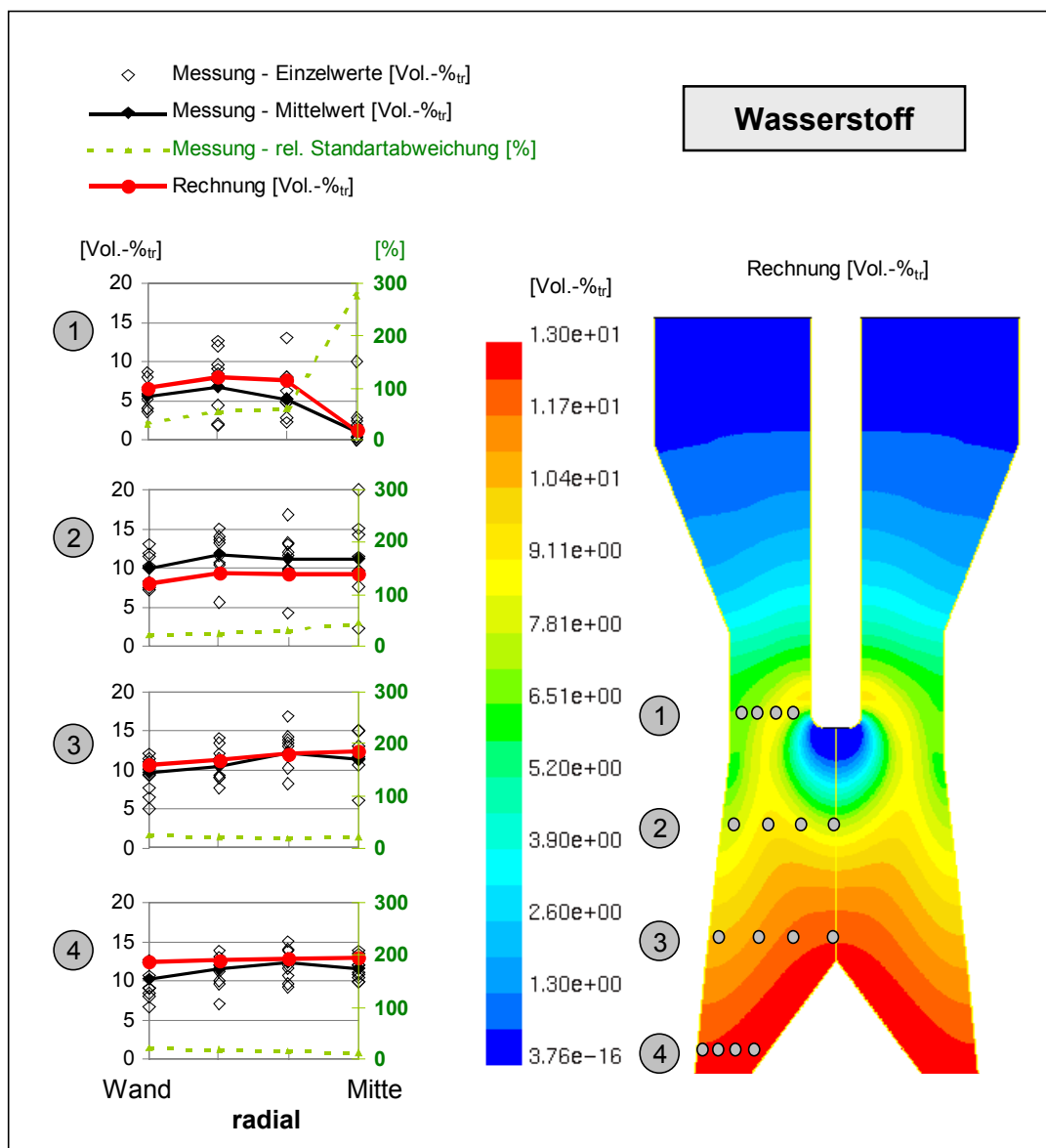


Abbildung 46 Entwicklung Wasserstoff

Der Volumenanteil an Wasserstoff steigt insbesondere zwischen der ersten und zweiten Meßebenen sehr stark an. Danach strebt er langsamer dem noch geringfügig erhöhten Endwert zu. Auch bei dieser Spezies ist ein Nichtvorhandensein nahe des Lufteintrittes und ein Rückgang der

Schwankungsbreite zum Austritt hin festzuhalten. Der berechnete Verlauf gibt die wesentlichen Entwicklungen der Meßwerte gut wieder.

4.1.8 Entwicklung der Kohlendioxidkonzentration

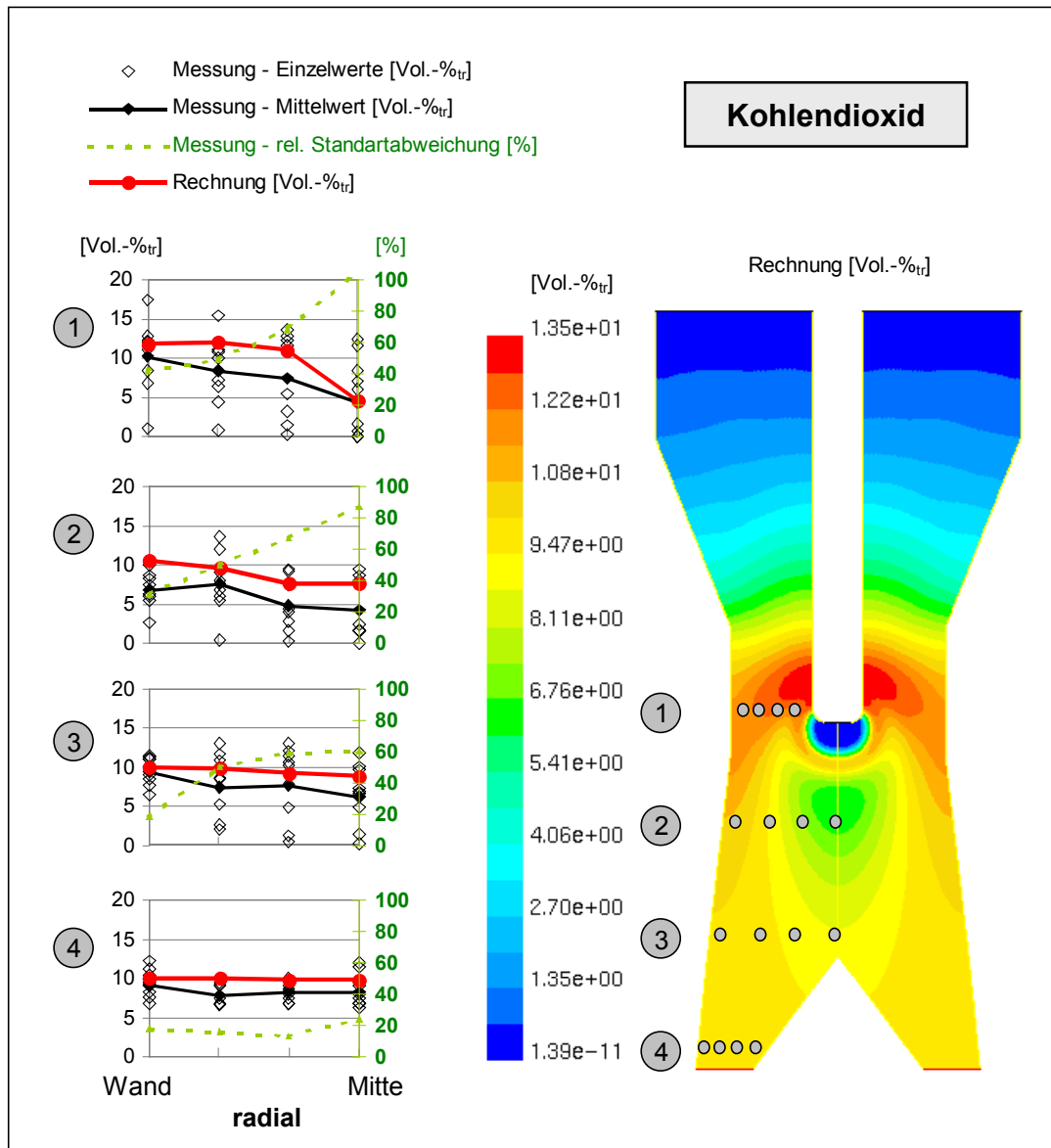


Abbildung 47 Entwicklung Kohlendioxid

Kohlendioxid steht über die Boudouard- und die homogene Wassergasreaktion mit Kohlenmonoxid sowie Wasserstoff- und Wasserdampf in einer Gleichgewichtsbeziehung. In Abbildung 47 sind die ermittelten Kohlendioxidkonzentrationen dargestellt.

Die Meßwerte zeigen in den Randgebieten gegenüber der Mittelachse des Vergasers erhöhte Konzentrationen. Das entspricht dem Verhalten des chemischen

Gleichgewichtes der Boudouardreaktion, welches bei den am Rand des Reaktors gemessenen niedrigen Temperaturen auf Seiten des Kohlendioxids liegt.

Der maximale Mittelwert wurde mit 10,3 Vol.-% am Rand der ersten Meßebeine ermittelt. Der minimale Wert befand sich mit 4,1 Vol.-% am Ort des höchsten Kohlenmonoxidanteiles in der zweiten Meßebeine (2-Mitte).

Zwischen den Meßebenen zeigt der berechnete Verlauf weitere Details. Der Luftzufuhr schließt sich nach unten ein lokales Maximum an und leitet die Hochtemperaturzone ein. Durch die sich anschließende Reduktionsreaktion folgt auch in den Rechenergebnissen ein lokales Minimum am Ort des Kohlenmonoxidmaximums. Anschließend stellt sich durch Ausgleich und die weiteren Reaktionen die Endgaszusammensetzung ein.

4.1.9 Methanverteilung und Berechnungen zur Quervermischung

Methan ist primär ein Produkt der Pyrolyse und kann sich darüber hinaus, insbesondere bei erhöhtem Druck, aus Wasserstoff an Koks bilden. Aufgrund der atmosphärischen Druckbedingungen am untersuchten Reaktor wurde auf die Aufnahme der letztgenannten Reaktion in der Berechnung verzichtet.

Methan setzt sich besonders bei hohen Temperaturen und unter Beisein eines Oxidationsmittels zu Wasserstoff und Kohlen(di)oxid um.

Die Meßwerte in Abbildung 48 zeigen einen Anstieg von der Reaktormitte zu den Randgebieten. Erst in der letzten Meßebeine ist das Bild über dem Radius nahezu ausgeglichen. Der höchste Mittelwert wurde mit 2,3 Vol.-% in der dritten Meßebeine ermittelt. Dies deutet, wie im Kapitel zur Partikelentwicklung (4.2) noch untermauert wird, auf eine spät ablaufende Pyrolyse hin.

Die erhöhte Differenz zwischen Meß- und Rechenergebnissen in den oberen Meßebenen ist nach Meinung des Bearbeiters in dem vereinfachten Pyrolysemodell zu suchen. Der festgelegte Massenanteil an den Pyrolyseprodukten und die Kinetikparameter beeinflussen den Ort und die Intensität der Entstehung von Methan. Die dargestellten Rechenergebnisse zeigen jedoch gut das Abdrängen aus der Oxidationszone und die anschließende Vergleichmäßigung über den Querschnitt.

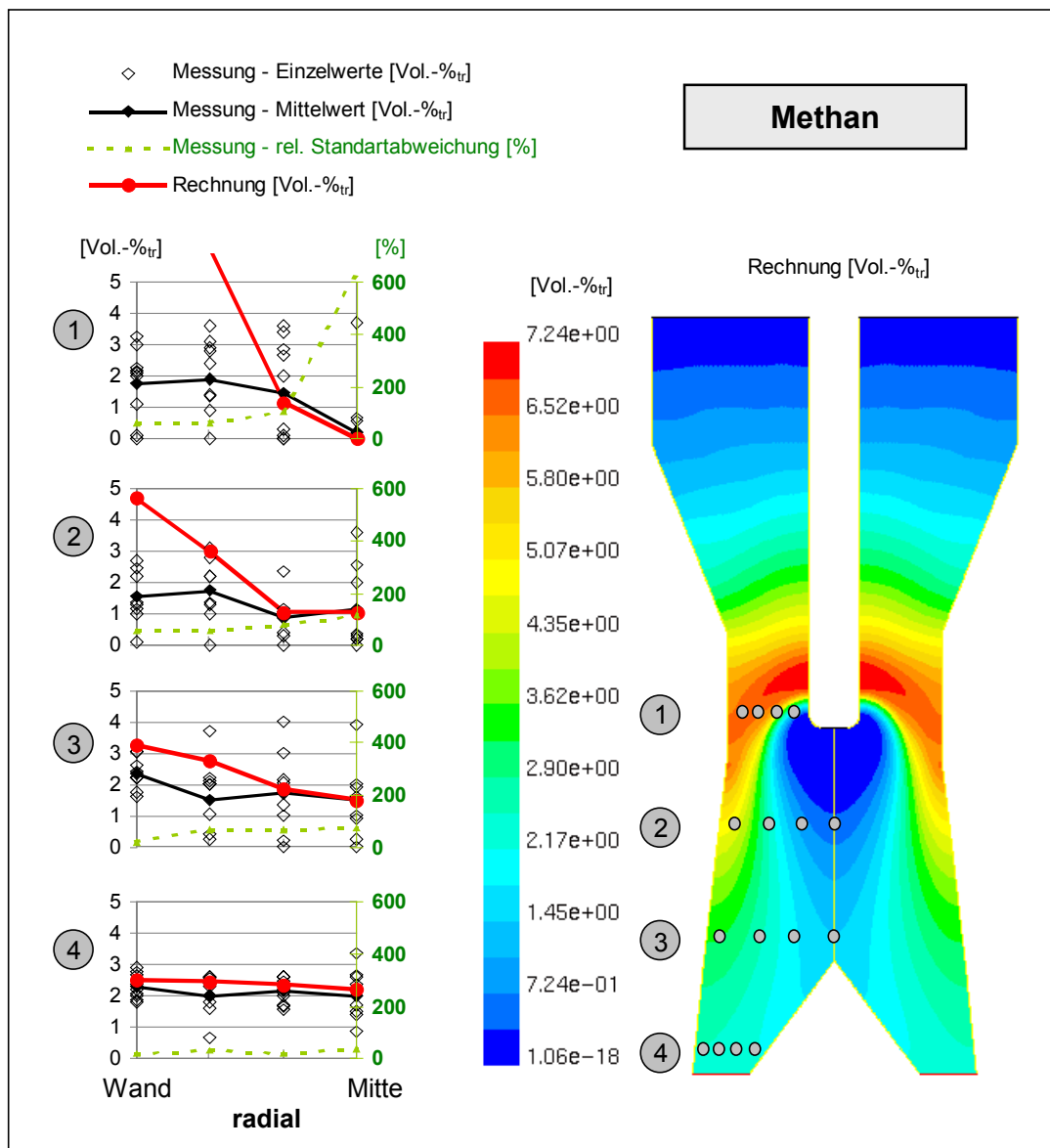


Abbildung 48 Entwicklung Methan

Für die letztgenannte Entwicklung der Vergleichmäßigung hat die Durchmischung eine hohe Bedeutung. Ein Rechenvergleich bei Variation von Parametern des verwendeten Modells zur dissipativen Quervermischung soll dies verdeutlichen (Abbildung 49).

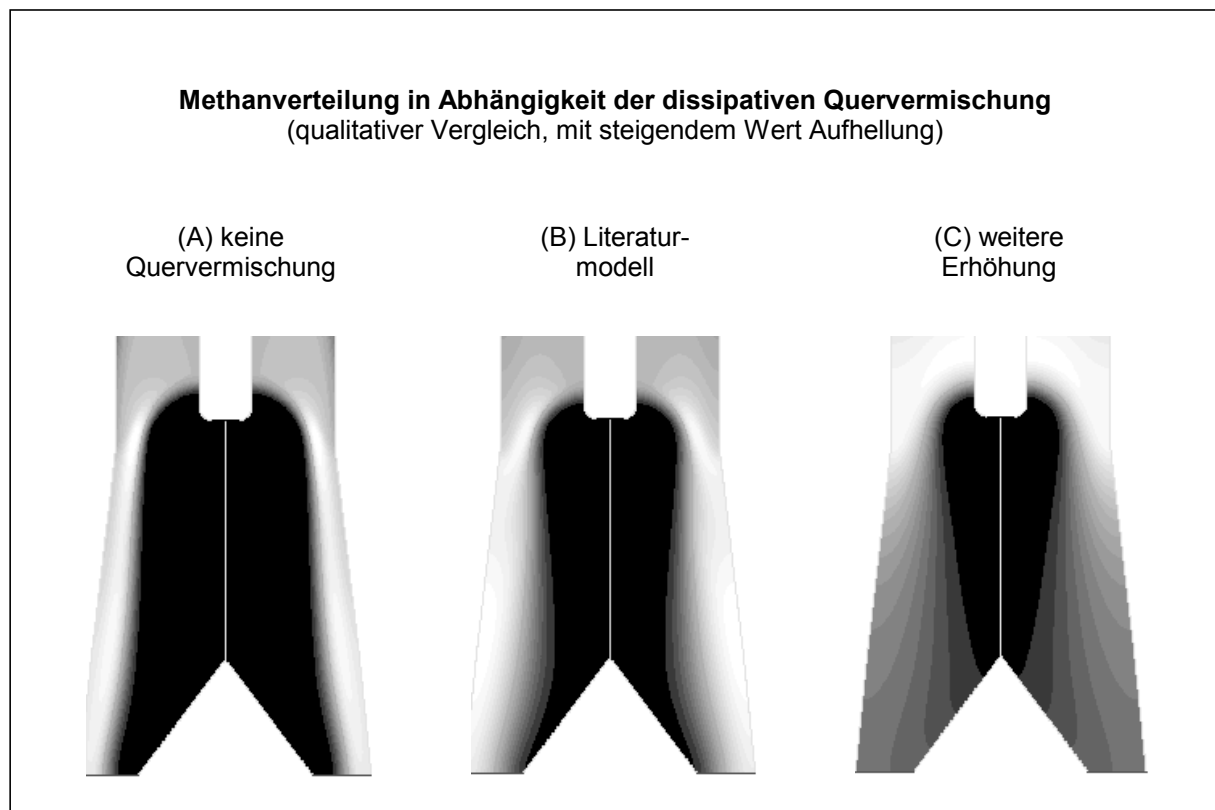


Abbildung 49 *Einfluß der Variation der dissipativen Quervermischung*

Ohne Quervermischung (A) gelangt Methan nicht in Zonen sehr hoher Temperatur. Die Spezies bildet nach ihrer Entstehung eine an der Wand bis zum Austritt reichende Strähne und ihr Umsatz wird gehemmt. Auf alle beteiligten Stoffe hat dies weitreichende Konsequenzen. Insbesondere ist die Einstellung des Gasgleichgewichtes über dem Radius stark behindert. Bei Nutzung des Literaturmodelles wurde das mittlere Bild (B) berechnet. Dies widersprach jedoch den Meßwerten, die eine intensivere Vermischung aufwiesen. Daher wurde im rechten Bild (C) die Diffusion um den Faktor 10 erhöht. Erst dann gaben die Rechenergebnisse die Realität wieder. Das Rechenmodell und die Annahmen zur Strömungsart bedürfen daher einer weitergehenden Untersuchung.

4.1.10 Verteilung und Krackung von Teer

Meßergebnisse zum Teerprofil im Reaktor lagen aufgrund der sehr aufwendigen Analyse dieser Komponente nicht vor. Das Pyrolyseprodukt Teer wird durch Oxidationsreaktionen und die thermische Krackung umgesetzt. Da erstere Reaktion im vorliegenden Fall aufgrund des diskutierten Abdrängens aus der Oxidationszone eine untergeordnete Rolle spielt, wurde auf sie in der Berechnung verzichtet.

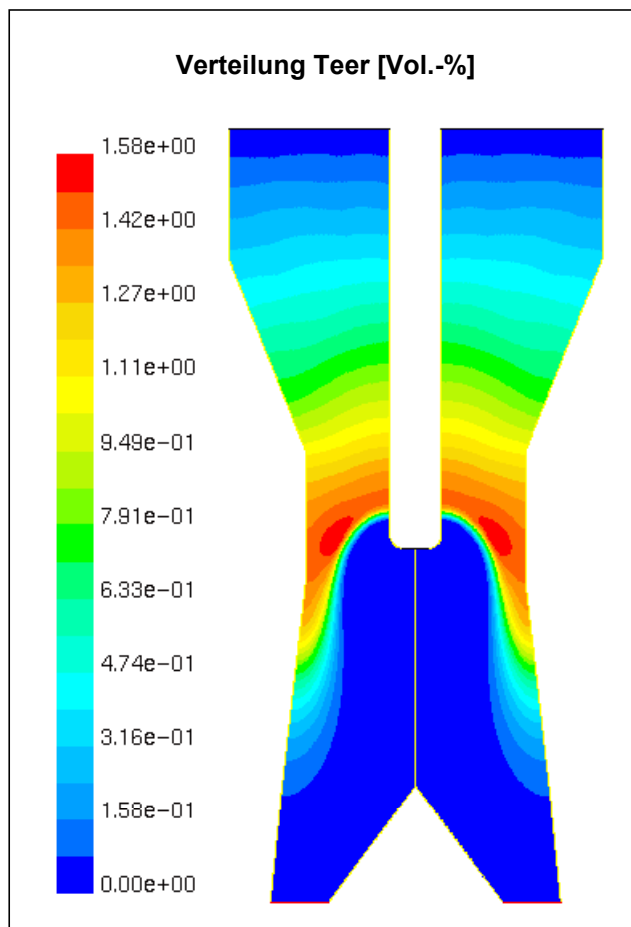


Abbildung 50 Entwicklung Teer

Der berechnete Verlauf in Abbildung 50 zeigt die Entstehung im oberen Teil des Reaktors, das anschließende Abdrängen und die Abnahme der Konzentration aufgrund der Teerkrackung. Das Ergebnis beruht auf der Auswahl von Kinetikdaten, die in der Literatur einer hohen Schwankungsbreite unterliegen. Beispielsweise werden für die Aktivierungsenergie Werte zwischen 165 kJ/mol und 273 kJ/mol vorgeschlagen /4/. Bereits die Festlegung innerhalb dieses Bereiches hat sehr große Auswirkungen, wie anhand der Variation zwischen den Grenzwerten deutlich wird (Abbildung 51).

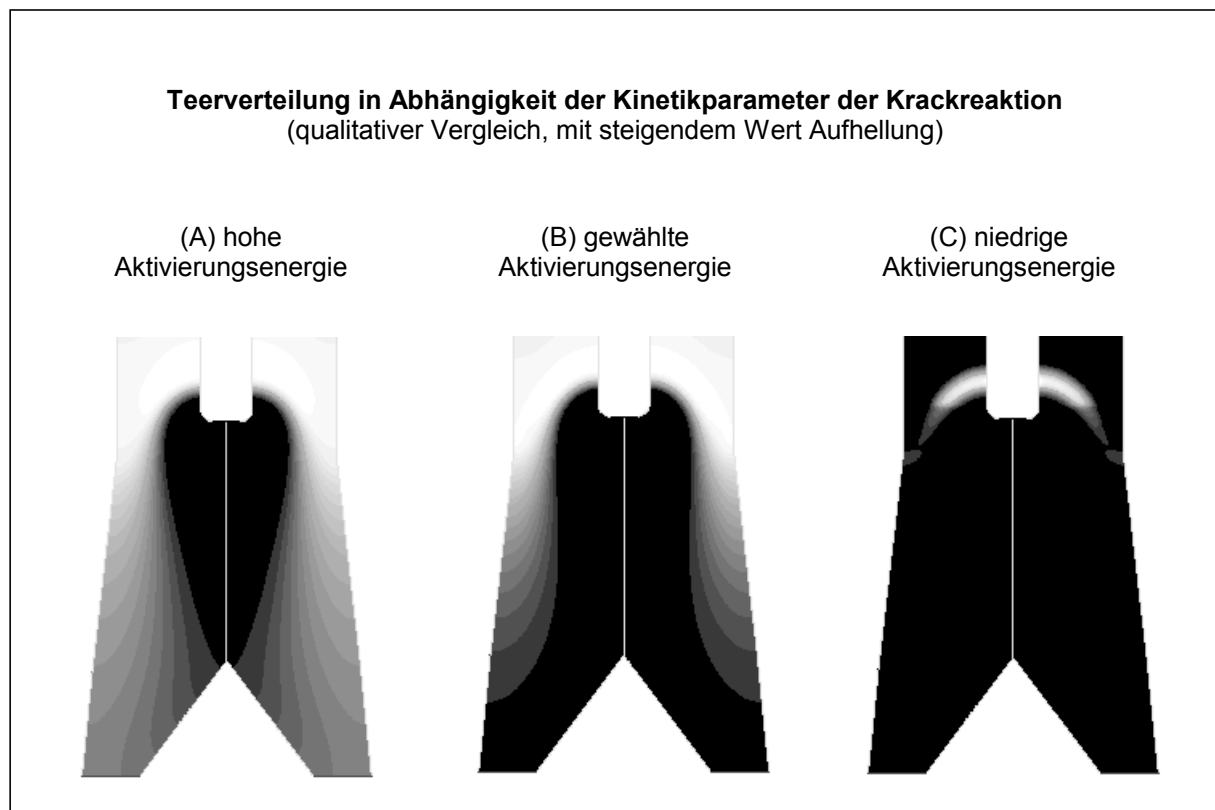


Abbildung 51 *Einfluß der Kinetikdaten auf die Teerkrackung*

Im linken Bild (A), bei Verwendung des höchsten Wertes für die Aktivierungsenergie, findet die Crackung nur untergeordnet statt, am Austritt ist noch eine große Menge an Teer vorhanden. Die Verringerung des Anteils beruht im wesentlichen auf Vermischung mit den anderen Gasen. Der ausgewählte Wert (Mitte-B) verursacht bis zum Austritt eine weitestgehende Crackung. Den Reaktor verläßt daher in der Berechnung ein nahezu teerfreies Gas. Die Auswahl der minimalen Aktivierungsenergie hat eine Crackung bereits nahe dem Ort der Entstehung zur Folge. So kommt es zu einem vollständigen Umsatz und es entsteht bereits in höheren Zonen des Reaktors ein teerfreies Gas (C).

4.2 Feststoff-Entwicklung

Partikel konnten nur in einer Gesamtprobe pro Meßebeane geborgen werden. Daher finden sich zur Beschreibung der gemessenen Feststoffentwicklung eindimensionale Darstellungen über der Reaktorhöhe anhand der fünf Stützstellen (Eintrag, drei Reaktorproben und Ascheaustrag). Ergänzt werden sie durch das berechnete zweidimensionale Profil des gleichen oder eines korrespondierenden Parameters.

4.2.1 Wassergehalt

Abbildung 52 gibt die gemessene und berechnete Entwicklung des Brennstoffwassergehaltes vom Brennstoffeintrag zum Ascheaustrag wieder.

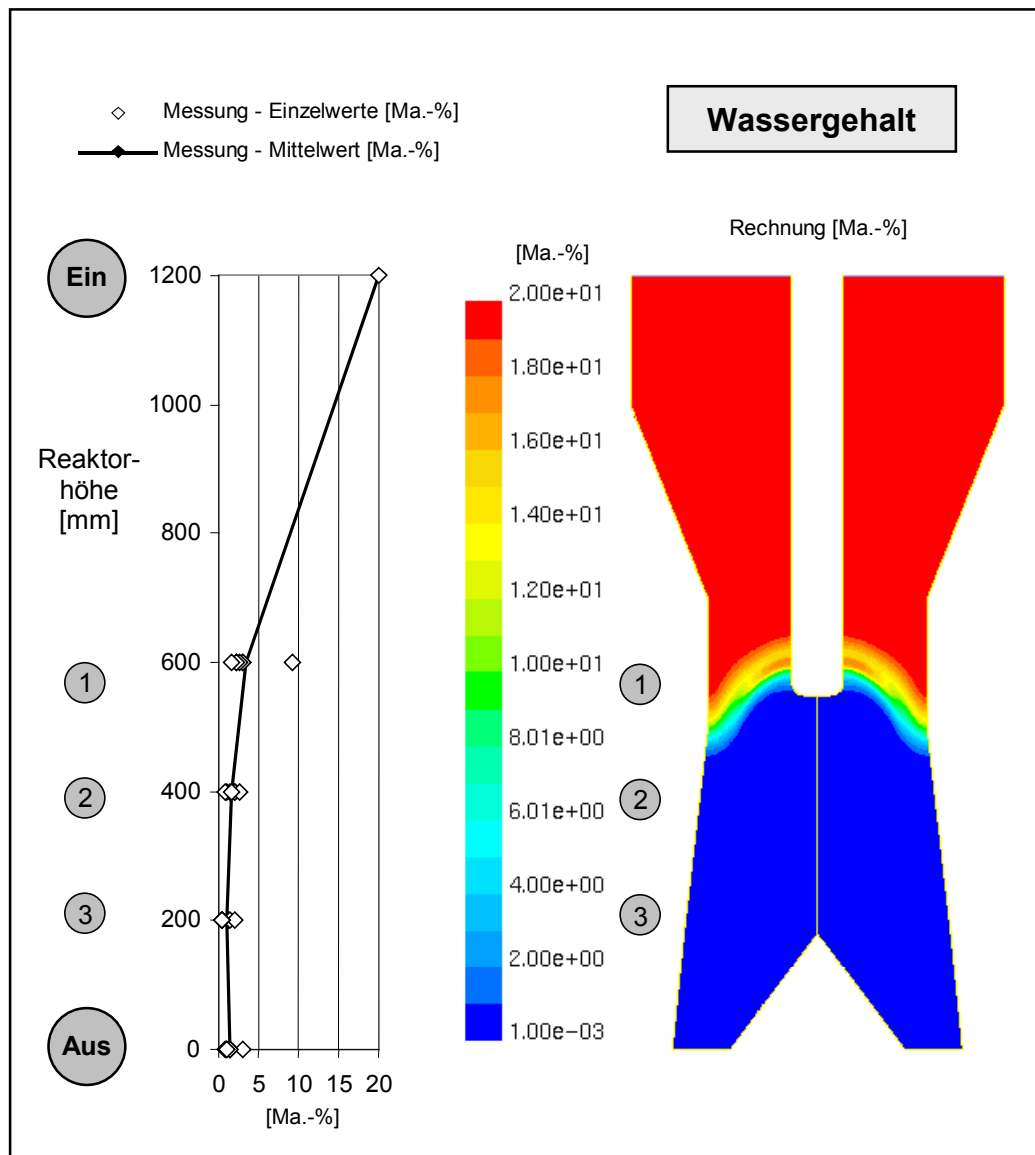


Abbildung 52 Gemessene und errechnete Entwicklung des Wassergehaltes

In Höhe des Lufteintrittes (1) ist der Brennstoff zum großen Teil getrocknet. Im weiteren Verlauf bleibt der Wassergehalt in der Größenordnung von 1 Ma.-%. Da in den Wandbereichen relativ geringe Temperaturen gemessen wurden, kann nicht ausgeschlossen werden, daß es sich um noch in den Partikeln vorhandene Restfeuchte handelte. Ebenfalls möglich ist jedoch, daß aufgrund des hohen Adsorptionsvermögens der entnommenen Holzkohle im Zeitraum bis zur Probenanalyse eine Feuchtebindung aus der Umgebungsluft stattgefunden hat.

4.2.2 Fluchtigengehalt

Abbildung 53 zeigt die Ergebnisse der Analysen für den Fluchtigengehalt der geborgenen Partikel sowie die berechnete Entwicklung des sich proportional verhaltenden trockenen unpyrolysierten Brennstoffes.

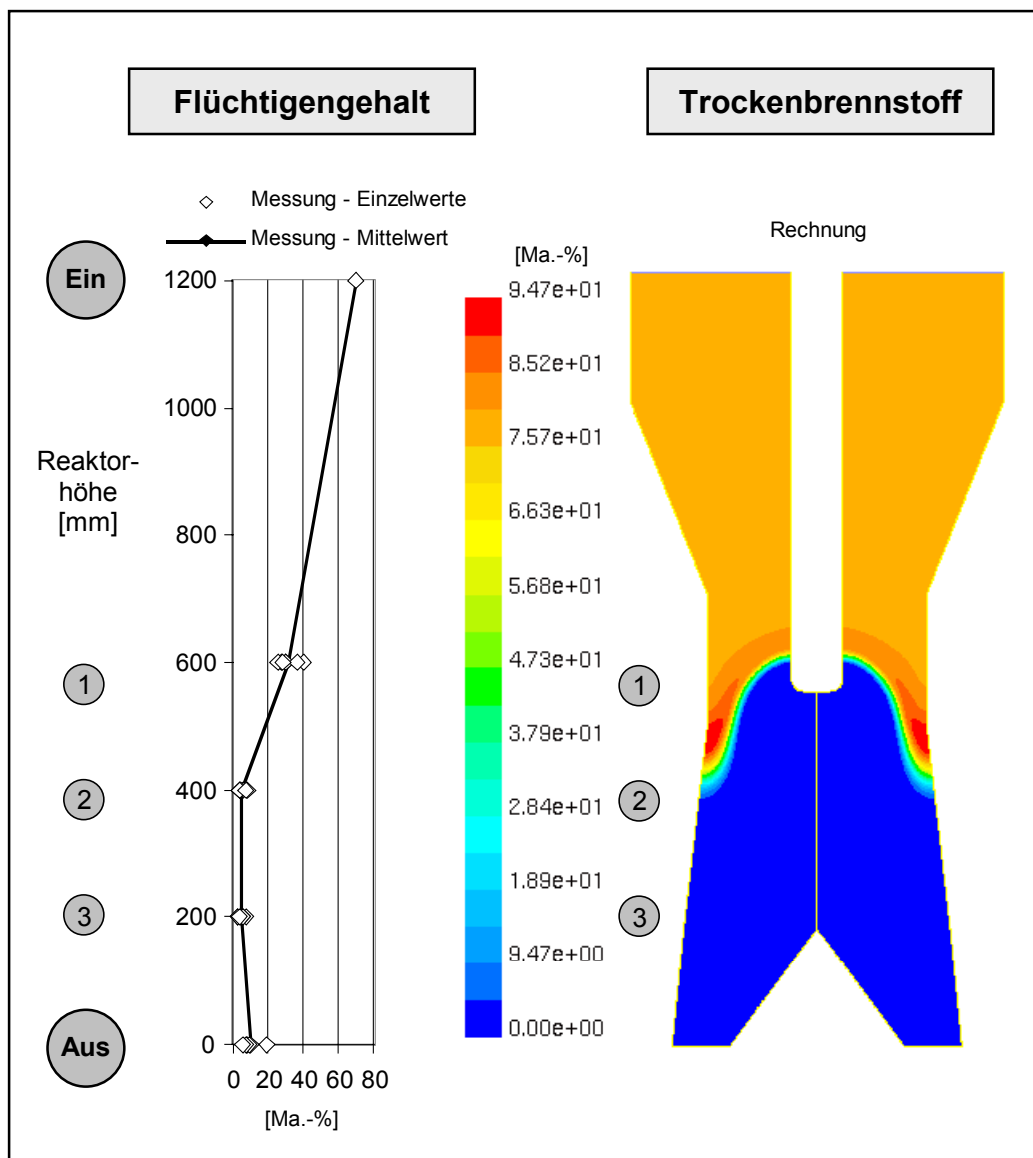


Abbildung 53 Gemessene Entwicklung des Fluchtigengehaltes und Anteil des berechneten unpyrolysierten trockenen Brennstoffes

In Höhe des Lufteintrittes (1) ist das Partikel noch nicht vollständig pyrolysiert, sondern enthält im Mittel noch 31 Ma.-% flüchtige Bestandteile und damit nahezu die Hälfte des ursprünglichen Gehaltes (ca. 70 Ma.-%). In der zweiten Meßebe (2) sind die Fluchtigen bis auf unter 10 Ma.-% ausgetrieben. Der Wert verringert sich dann jedoch nicht mehr merklich. Analog zur Diskussion über den in den unteren Meßebenen ebenfalls nicht gänzlich ausgetriebenen Wassergehalt kommen hierfür

als mögliche Ursachen eine unvollständige Pyrolyse in den Wandbereichen sowie ein nachträgliches Anlagern von Wasser aus der Atmosphäre an den stark hygroskopischen Stoff Koks in Frage. Denkbar ist jedoch auch eine teilweise Rückkondensation von sehr hoch siedenden Kohlenwasserstoffen an kühleren Stellen nahe des Austrittes und der Ascheaustragsvorrichtung.

Der hohe Flüchtigenganteil in Ebene (1) deutet auf einen relativ späten Verlauf der Pyrolyse hin.

In Abbildung 54 wird die berechnete Pyrolyseintensität in einem eng begrenzten Gebiet kurz oberhalb der Hochtemperaturzone wiedergegeben und durch die Partikelverweilzeit von der Schüttungsoberfläche bis zum Umsatz ergänzt. Diese betrug im Mittel etwa drei Stunden. Die Ergebnisse der Rechnung weisen ebenfalls auf eine spät einsetzende Pyrolyse hin.

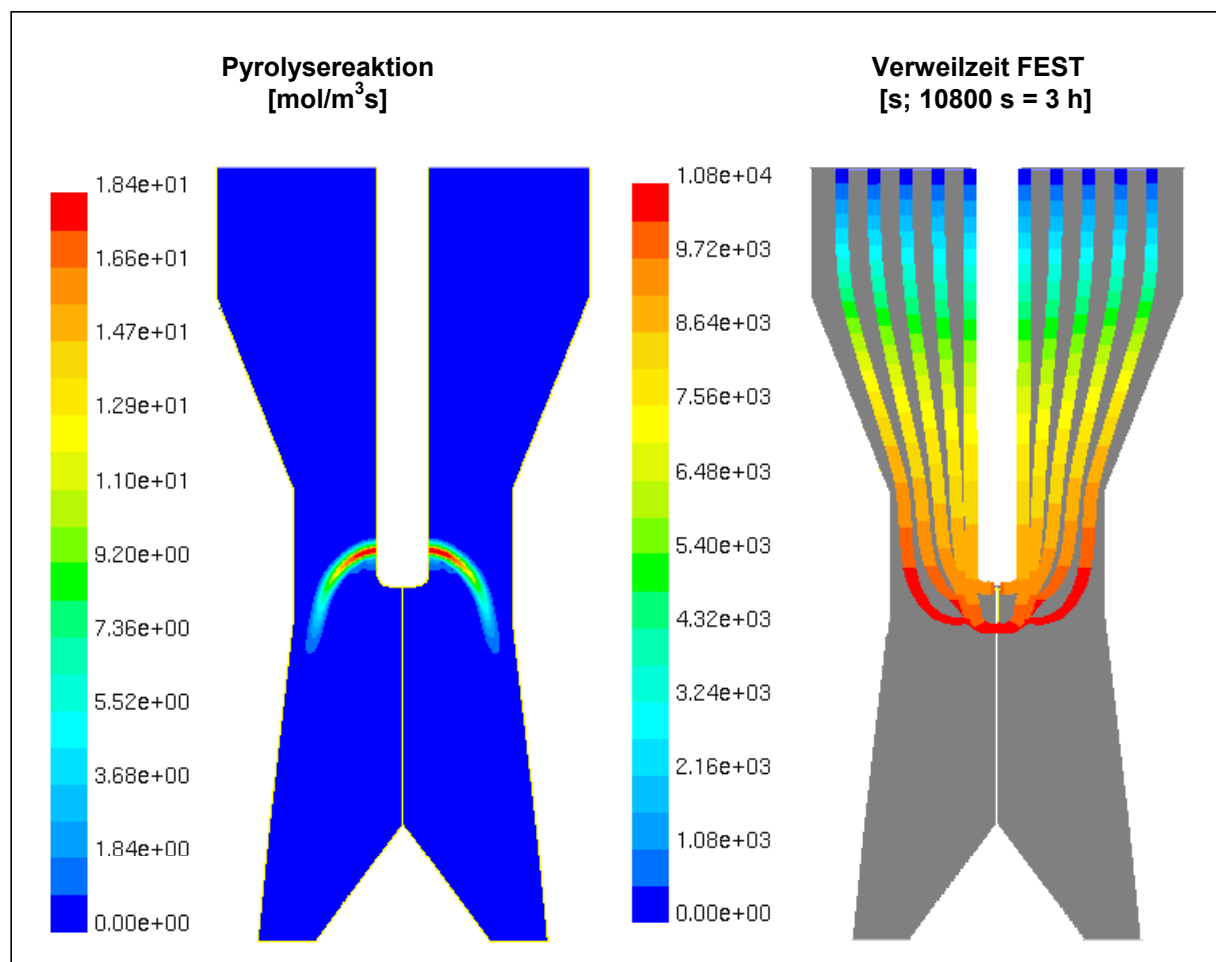


Abbildung 54 Verweilzeit des Feststoffes bis Höhe Luftzufuhr

4.2.3 Aschegehalt

Die experimentell ermittelte Entwicklung des Aschegehaltes der Partikel über der Reaktorhöhe zeigt Abbildung 55. Ergänzt wird sie durch den berechneten Massenanteil des Kokes.

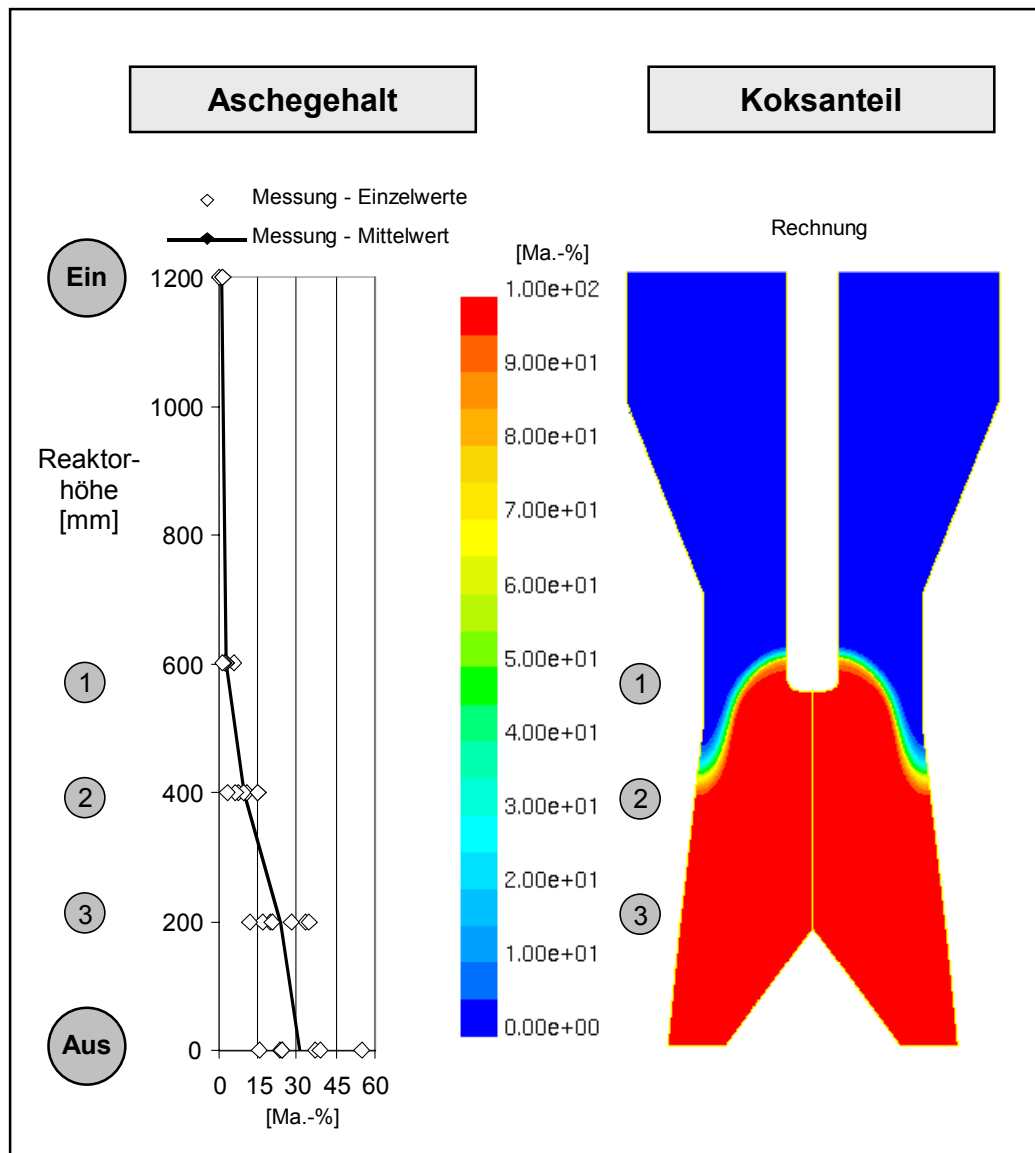


Abbildung 55 Gemessene Entwicklung des Aschegehaltes und berechneter Koksanteil

Das Abprodukt des Vergasers ist verfahrensbedingt keine reine Asche, sondern ein Restkoks, dessen Aschegehalt im Mittel der Analysen bei 31,2 Ma.-% lag. Bei der anfallenden Menge handelte es sich aufgrund des geringen Aschegehaltes des Ausgangsstoffes (Analysewert: 0,33 Ma.-%) bei den angenommenen

Pyrolysebedingungen um 2,3 Ma.-% der prozeßintern entstandenen Holzkohle, welcher als Verlust zu bilanzieren ist.

Koks entsteht während der Pyrolyse und hat aufgrund der Nichtbilanzierung der Asche in der Berechnung im unteren Teil des Reaktors einen Anteil von 100 Ma.-%.

4.2.4 Entwicklung der Partikelgröße

Zur Kontrolle der geometrischen Annahmen in der Simulation wurde eine Siebkennlinien von Partikelproben angefertigt (Abbildung 56).

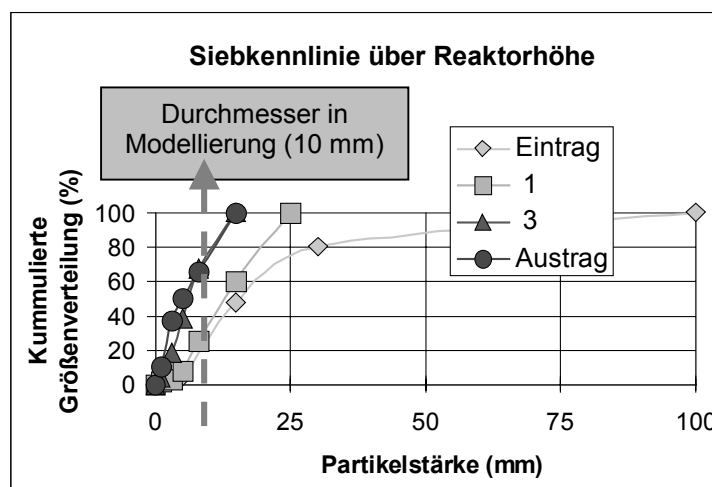


Abbildung 56 Partikelgrößenverteilung in verschiedenen Reaktorhöhen

Sie zeigt in ihrer Verringerung die erwartete Entwicklung. Bis zur ersten Entnahmestelle kurz oberhalb der Luftzufuhr hat sich die Partikelgröße durch Trocknung und Pyrolyse noch nicht stark verändert. Aufgrund von Spannungen kam es hauptsächlich zur Sprengung größerer Partikel. Bis zur dritten Meßebeene hat sich der Durchmesser hingegen stark verringert. Dazwischen liegt der Ort des stärksten Koksumsatzes, da sich bis zum Restkoksaustrag keine gravierende Änderung mehr zeigt.

Zur Einordnung wurde in das Diagramm der in der mathematischen Modellierung angenommene Partikeldurchmesser eingezeichnet. Er gibt die Partikelform an den Orten der stärksten Reaktionsintensität wieder und ist damit gut geeignet.

4.3 Rückschluß auf das Reaktionsverhalten im Vergaser

Im folgenden soll das Reaktionsverhalten im untersuchten Vergaser hergeleitet und mittels Abbildung 57 erläutert werden.

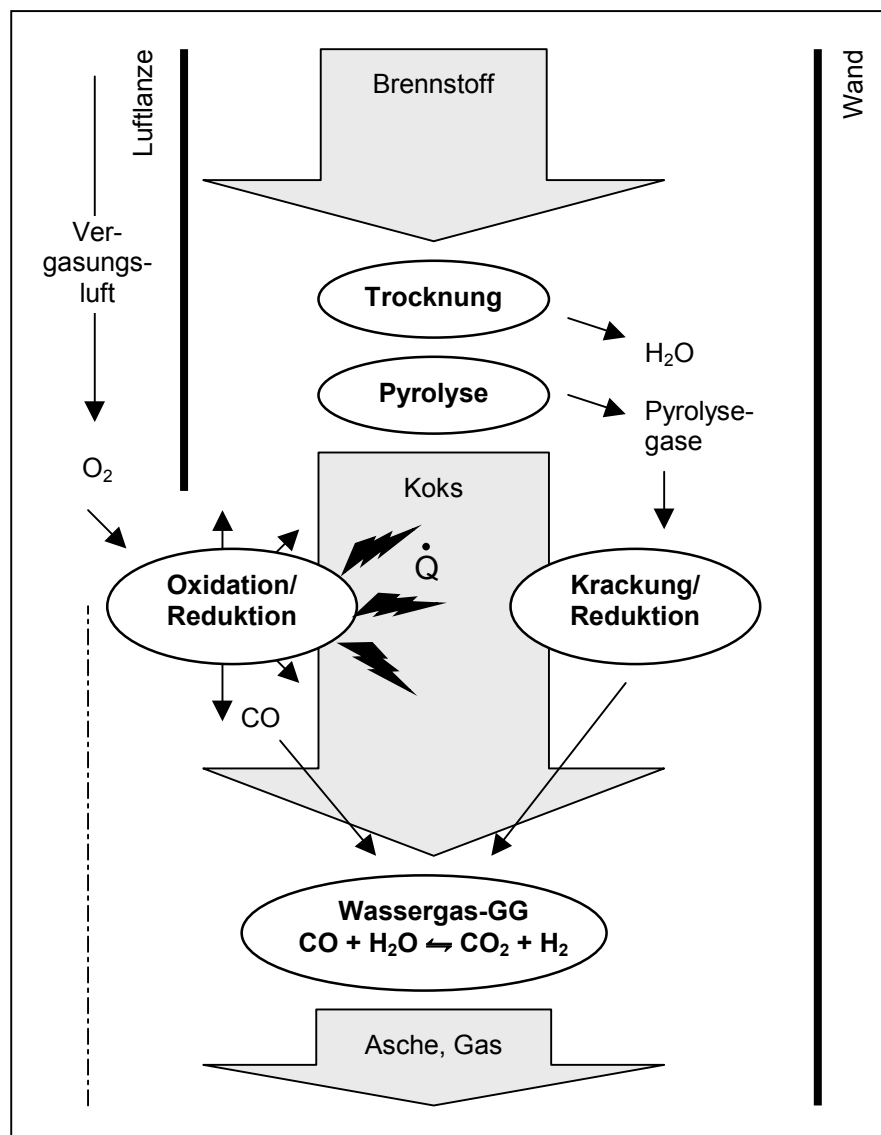


Abbildung 57 Postuliertes Reaktionsverhalten

In Höhe der Luftzufuhr und damit in der Nähe der maximalen Temperaturen wies der geborgene Feststoff bereits einen erhöhten Ascheanteil auf. Desgleichen war ein nicht zu vernachlässigender Flüchtigengehalt zu verzeichnen. Dies deutet auf einen teilweise parallelen Ablauf von Pyrolyse sowie Oxidations- und Reduktionsreaktionen in dieser Zonen hin.

Die Meßergebnisse weisen auf eine spät einsetzende Pyrolyse hin. Die relativ lange Verweilzeit oberhalb dieser Zone trägt nur untergeordnet zum Prozeß bei. Die Rechenergebnisse und der nachfolgende Literaturvergleich stützen diese Aussage.

Das Fehlen von wasserstoffhaltigen Gasen (H_2 , CH_4) in den Messwerten nahe der Luftzufuhr führt zu dem Schluß, daß die Pyrolyseprodukte durch die Oxidationsgase und deren Produkte abgedrängt werden. Damit wird deren Abbrand mit Luftsauerstoff und die Teerkrackung in der Hochtemperaturzone verhindert.

Statt dessen reagiert der Luftsauerstoff im Zentrum des Reaktors mit dem in der Pyrolysezone entstandenen und sich nach unten bewegendem Koks zu Kohlenmonoxid/Kohlendioxid. Eine hohe Temperatur und das Maximum an Kohlenmonoxid am Ende dieser Zone sind die Folge. Diese hohen Temperaturen beschleunigen die angestrebte Krackung der höheren Kohlenwasserstoffe jedoch nicht ausreichend, da der radiale Wärmetransport, d.h. quer zur Strömungsrichtung, nicht ausreicht, um die am Rand des Reaktors strömenden Pyrolyseprodukte auf hierfür notwendige Temperaturen aufzuheizen.

Erst im weiteren Verlauf verursacht die dissipative Quervermischung das Zusammentreffen des Kohlenmonoxides mit Wasserdampf und anderen gasförmigen Pyrolyseprodukten. Dabei erfahren diese eine Aufheizung durch Temperatúrausgleich. Dies führt zu einem teilweisen Umsatz von Methan und Teeren sowie zu weiteren Reduktionsreaktionen am Koks.

Die Austrittszusammensetzung wird im wesentlichen über das homogene Wassergasgleichgewicht bestimmt.

Es muß daher festgestellt werden, daß mit dem untersuchten Prozeß kein teerfreies Gas erzeugbar ist, da:

- die Orte hoher Temperaturen einerseits und das Auftreten der Teere andererseits nicht übereinstimmen
- im Temperaturbereich der Teerkrackung die endothermen Reduktionsreaktionen am Koks sehr schnell verlaufen, somit die Temperatur senken und eine hinreichende Verweilzeit unter den notwendigen Temperaturen nicht zulassen

Die Schwankungsbreite von Temperatur und Gaszusammensetzung nimmt vom Lufteintritt zum Gasaustritt am Boden des Vergasers ab.

So bewegte sich die relative Standardabweichung für die Kohlenmonoxidkonzentration von wenigen Prozenten nahe des Reaktorbodens (12,3 % an der innersten Position) bis 98,7 % in der Nähe der Luftzufuhr. Die Meßwerte schwankten am letztgenannten Ort von 0,0 Vol.-%_{tr} bis 32,0 Vol.-%_{tr} bei einem Mittelwert von 11,9 Vol.-%_{tr}.

Nach Meinung des Bearbeiters sind diese Schwankungen und ihre Ausprägung über der Höhe prozeßinhärent. Folgende Gründe für das Auftreten können genannt werden:

- diskontinuierliche Befüllung und damit unregelmäßiger Feuchte- und Flüchtigeneintrag
- ungleichmäßige Bewegung der Schüttung, aufgrund zeitlich und örtlich variabel auftretender Brückenbildungen (durch Verkeilen, Verkleben oder Aufquellen von Partikeln)
- breite Partikelgrößenverteilung (größere Partikel bringen Wasser und Flüchtige in tiefer gelegene Zonen)
- Inhomogenitäten im Brennstoff

Grund für die markante Verringerung der Schwankungsbreite auf dem Weg vom Lufteintritt zum Brenngasaustritt ist einerseits eine Vergleichmäßigung durch radiale Vermischung. Andererseits ist die Hochtemperaturzone (nahe dem Lufteintritt) mit ihrer starken Reaktionsintensität in ihrem Verhalten gegenüber einer schwankender Gaszusammensetzung empfindlicher als tiefergelegene Zonen mit geringeren Temperatur- und Spezieskonzentrationsgradienten.

4.4 Vergleich mit der Literatur

Experimentelle Arbeiten

Anhand von zwei Grafiken aus in der Einführung genannten Arbeiten soll ein Vergleich der vorliegenden Ergebnisse vorgenommen werden.

Das Ergebnis der älteren Literatur /56/ ist in Abbildung 58 wiedergegeben. Hier wurden geborgene Partikel auf ihren Flüchtigengehalt (in Ma.-%) hin untersucht.

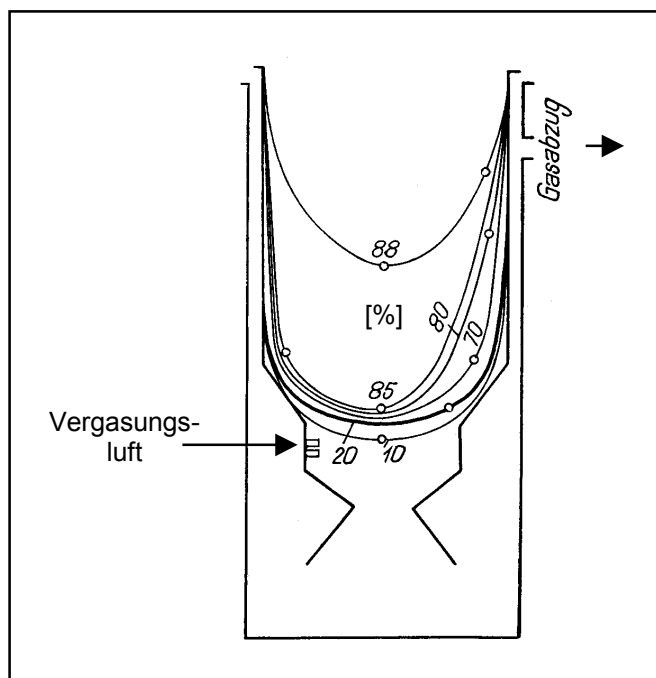


Abbildung 58 Kurven gleichen Gehaltes an Flüchtigen bei einem Imbert-Generator

Übereinstimmend mit den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit verringert sich der Flüchtigengehalt bis in sehr tiefe Regionen (kurz oberhalb der Luftzufuhr) nur geringfügig. Allein in eng begrenzten Wandgebieten kommt es wegen Aufheizung durch das im Zwischenmantel abgeleitete Brenngas zu Verkokungen. Die Pyrolyse verläuft danach nahe der höher temperierten Zonen binnen weniger Zentimeter nahezu vollständig ab (der Gesamtreaktor hatte eine Höhe von ca. 1,5 m).

Diese Tendenz wird auch von der jüngeren Arbeit /26/ bestätigt. Es handelte sich hierbei um einen absteigenden Vergaser, bei dem zusätzlich zum oberen Lufteintritt an der Entaschung Sekundärluft im Gegenstrom beigegeben wurde.

Das Temperaturprofil in Abbildung 59 zeigt noch kurz oberhalb der Primärluftzufuhr Temperaturen um 300 °C, die den späten Beginn der Pyrolyse markieren. Die Maximaltemperaturen bis ca. 1200 °C entsprechen den in der vorliegenden Arbeit gemessenen höchsten Mittelwerten. Sie treten eng begrenzt auf und fallen schnell auf Werte um 900 °C.

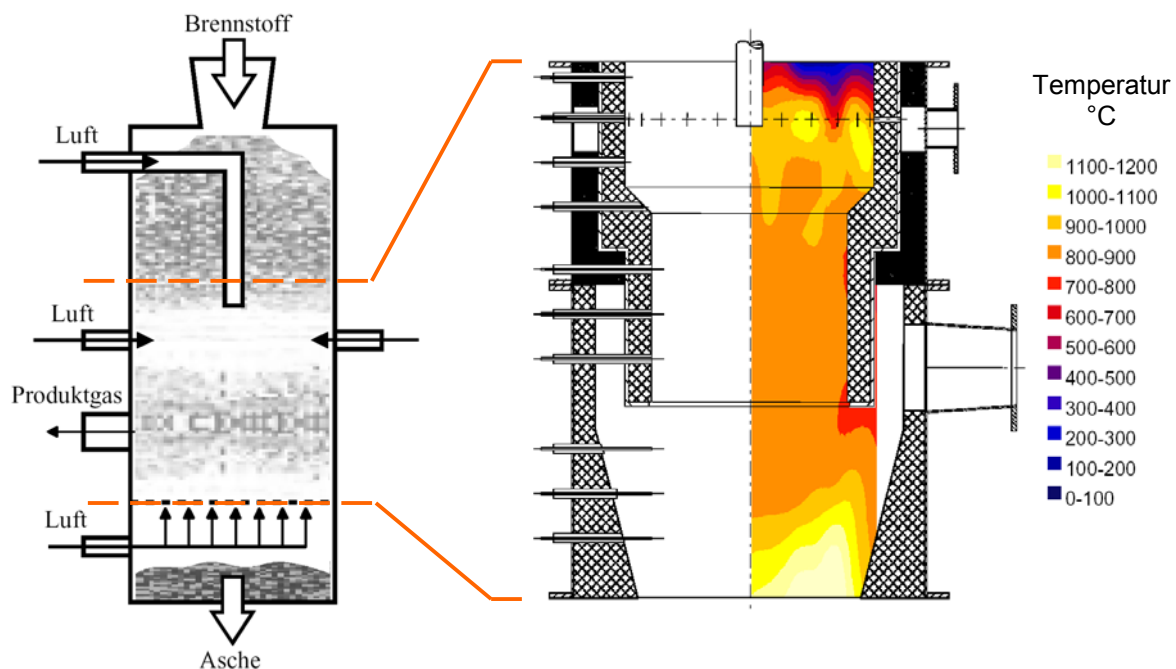


Abbildung 59 Verfahrensprinzip und Temperaturprofil im Reaktionsraum
(Ausschnitt) des Zweizonenvergasers der TU Graz

Mathematische Modellierungen

Hier soll der Vergleich zeigen, welche Ergebnisse mit den bisher üblichen Zoneneinteilungen und eindimensionalen Simulationen bereits erreicht werden konnten und welche Aussagen erst durch Mehrdimensionalität in der vorliegenden Arbeit möglich wurden.

Abbildung 60 zeigt ein Ergebnis bei Einzelbilanzierung in vier Teilprozessen /24/. Bereits in dieser Grobeinteilung konnten die vom Hersteller der Originalanlage konzipierten Werte fundiert widerlegt werden. Mit der vorliegenden Arbeit kann ergänzt werden, daß die Maximaltemperaturen zwar im theoretisch möglichen Bereich liegen, aber entgegen den Annahmen des Herstellers nicht über dem gesamten Querschnitt, sondern eng begrenzt zur Verfügung stehen.

Die aufbauende lineare Interpolation bei Übertragung auf die Reaktorgeometrie (Abbildung 61) ließ zusätzlich Aussagen zu Verweilzeiten in den Temperaturbereichen zu. Allerdings kann hierbei das exponentiellen Reaktionsverhaltens über der Temperatur nicht berücksichtigt werden.

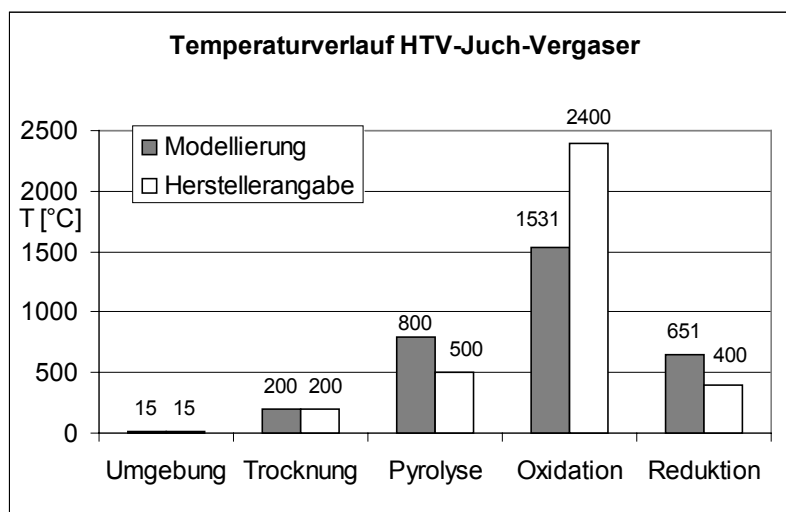


Abbildung 60 Zonentemperaturen im Original-Vergasers nach Herstellerangaben und Modellierung

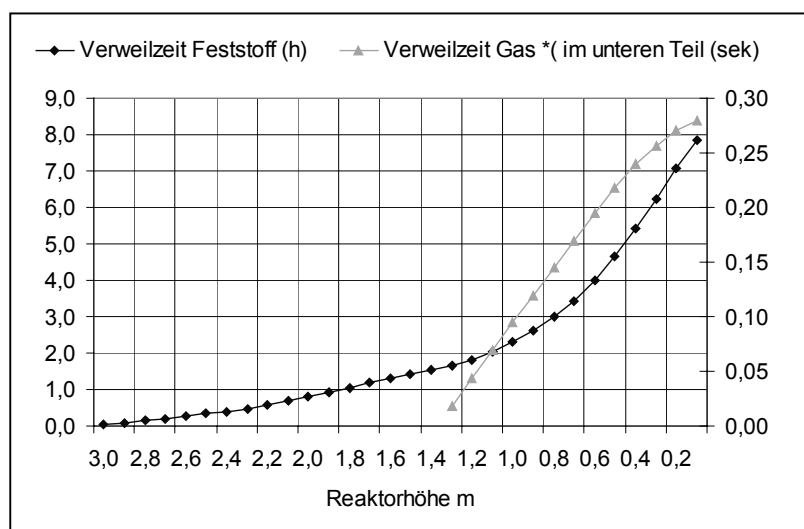


Abbildung 61 Verweilzeiten Feststoff/Gas bei Interpolation

Aufgrund der langen Verweilzeit des Feststoffes bis zur Luftzufuhr deutete sich eine lange Entgasungszeit an. Die vorliegende Arbeit widerspricht dem insoweit, als daß aufgrund der weit herunter reichenden niedrigen Temperaturen die Pyrolyse erst sehr spät stattfindet.

Bei Überschlagung der Verweilzeiten des Gases im unteren Reaktorteil wurde bereits erkannt, daß diese nicht zum Umsatz der höheren Kohlenwasserstoffe ausreichend sind.

Mittels eines eindimensionalen Zellenmodells (/4/, /19/ in Abbildung 62) ist durch die Nutzung von Kinetikansätzen die Einbindung der wesentlichsten nichtlinearen

Einflüsse möglich. Der Temperaturverlauf zeigt deutlich die geringe Ausdehnung der Hochtemperaturzone. Daß diese Beschränkung ebenfalls radial gilt und damit für Teilströme in völlig anderen Temperaturverläufen resultiert (Temperaturspitze im Kern und niedriger Verlauf am Rand), kann, aufgrund der Mittelung über dem Reaktorquerschnitt, nicht vorausgesagt werden.

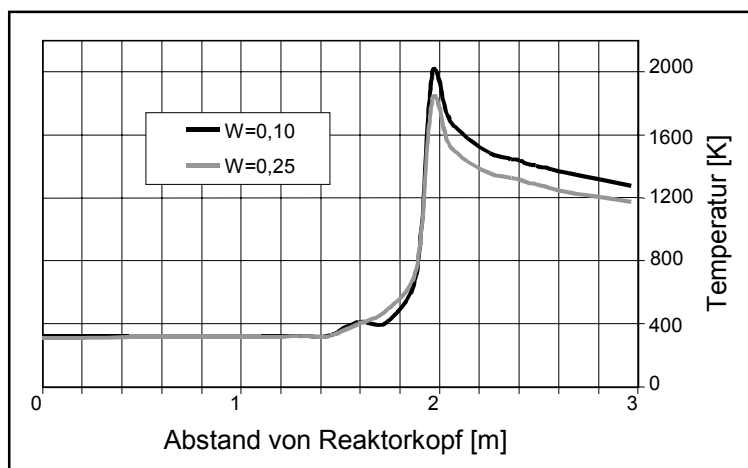


Abbildung 62 Temperaturverlauf im Vergaser der Originalanlage nach Zellenmodell bei Variation des Brennstoffwassergehaltes

Es kann festgestellt werden, daß die experimentellen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit die aus der Literatur zitierten Ergebnisse bestätigten und diese um erweiterte Aussagen zur Gas- und Partikelentwicklung ergänzen konnte.

Auf dem Gebiet der mathematischen Simulation sind bereits mit einfachen Mitteln Grobaussagen möglich. Die eindimensionalen Zellenmodelle können die nichtlineare Reaktionschemie in der Hauptrichtung des Prozeßfortschrittes berücksichtigen. Jedoch erst in der mehrdimensionalen Betrachtung, wie sie in der vorgelegten Arbeit angewendet wurde, können die ausgeprägten Temperatur- und Speziesprofile und damit die entscheidenden Charakteristiken des Prozesses wiedergegeben werden.

4.5 Äußere Bilanzierung bei Variation des Wassergehaltes

Im folgenden soll die Eignung der mathematischen Simulation zur Nachbildung auch veränderter Betriebsbedingungen nachgewiesen werden. Dies geschieht durch Vergleich von gemessenen und errechneten äußeren Werten, insbesondere der sich ändernden Produktgaszusammensetzung.

Als Variable wurde der Wassergehalt des eingesetzten Brennstoffes gewählt. Hierzu standen Meßwerte von 12 Versuchen in einem Bereich von 4,7 Ma.-% bis 48,3 Ma.-% zur Verfügung /77/. Ihnen wurden Rechenergebnisse bei 10, 20 und 30 Ma.-% gegenübergestellt. Alle weiteren Randbedingungen wurden konstant gehalten.

Bei den gemessenen und errechneten Ergebnissen des trockenen Produktgases handelt es sich für den verwendeten Brennstoff und die untersuchte Vergaserart um typische Werte. In Tabelle 22 erfolgt eine grobe Einordnung in Untersuchungen, bei denen an einem ähnlichen Vergaser /56/ verschiedene Holzarten eingesetzt wurden:

Tabelle 22 Einordnung Brenngaszusammensetzung

| | Rechnung Vol.-% | TU Dresden /77/ Vol.-% | Literatur /56/ Vol.-% |
|-----------------|--------------------|---------------------------|--------------------------|
| CO | 21,0 ... 24,7 | 14,3 ... 27,5 | 17,2 ... 23,1 |
| CO ₂ | 7,9 ... 10,2 | 7,5 ... 13,5 | 8,8 ... 12,4 |
| H ₂ | 12,2 ... 14,7 | 9,6 ... 13,8 | 14,5 ... 17,3 |
| CH ₄ | 1,3 ... 2,2 | 1,95 ... 2,31 | 1,1 ... 2,5 |

Der mit der Vergasungsluft eingetragene Stickstoff ist mit etwa der Hälfte des Volumens die Hauptkomponente und eine Ursache für den geringen volumenspezifischen Heizwert des Produktgases. Wichtigste weitere Komponenten des trockenen Brenngases sind, in der Reihenfolge ihres Anteiles, zuerst die gewünschten brennbaren Spezies Kohlenmonoxid und Wasserstoff. Unvermeidbar, da bei der Energiebereitstellung entstehend, ist des weiteren Kohlendioxid. Die mit 1,95 Vol.-%_{tr} bis 2,31 Vol.-%_{tr} geringste gemessene Komponente ist Methan. Aufgrund der großen Reaktionsenthalpie bei der Oxidation von -785 kJ/mol (gegenüber -280 kJ/mol bei Kohlenmonoxid und -230 kJ/mol bei Wasserstoff) ist dessen Anteil für den energetischen Wert des Brenngases von besonderer Bedeutung.

Der Vergleich der gemessenen und der errechneten Entwicklung von Kohlenmonoxid und -dioxid über den Wassergehalt verdeutlicht dessen Einfluß auf die Zusammensetzung des Produktgases (Abbildung 63).

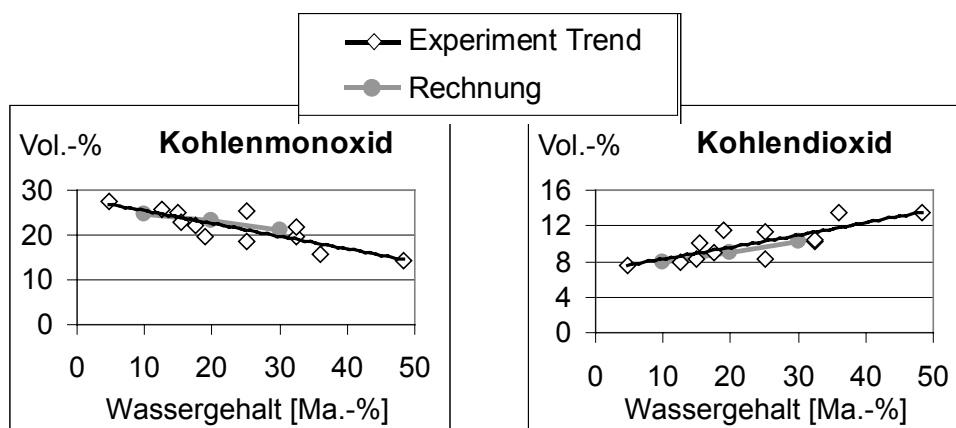


Abbildung 63 Kohlenmonoxid und Kohlendioxid über Wassergehalt

Das zusätzlich eingetragene Wasser verursacht einen erhöhten Energiebedarf für die Trocknung, so daß weniger Energie in chemisch gebundener Form des Kohlenmonoxides aus dem Vergaser ausgetragen werden kann. Des weiteren fördert zusätzlicher Wasserdampf in der homogenen Wassergasreaktion den Umsatz von Kohlenmonoxid zu Kohlendioxid.

Die gemessenen und errechneten Werte bestätigen diese theoretische Betrachtung. Der gemessene Anteil des Kohlenmonoxids sinkt von 27,5 Vol.-% bei einem Brennstoff-Wassergehalt von 5 Ma.-% auf 19,1 Vol.-%_{tr} bei 33,5 Ma.-%_{tr}. Dem gegenüber steigt der Anteil der Ballastkomponente Kohlendioxid (da ohne Heizwert) von 7,5 auf 11,4 Vol.-%_{tr} auf das ca. 1,5-fache. Die mathematische Simulation gibt diese Vorgänge sowohl qualitativ als auch quantitativ wieder. Auch hier fällt der Kohlenmonoxidanteil von 24,7 auf 21,0 Vol.-%_{tr} bei 10 bzw. 30 Ma.-% Wassergehalt, während der Kohlendioxidgehalt von 7,9 auf 10,2 Vol.-%_{tr} ansteigt.

Der Vergleich von Experiment und Simulation bezüglich Wasserstoff und Methan ist nicht befriedigend. In beiden Fällen stimmen die Absolutwerte in ihrer Größenordnung zwar überein, die Entwicklung über dem Wassergehalt konnte jedoch nicht exakt wiedergeben werden.

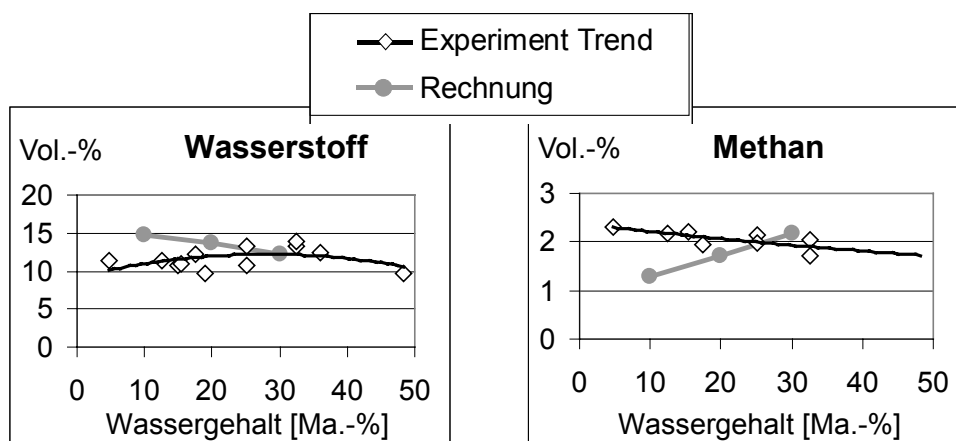


Abbildung 64 Wasserstoff und Methan über Wassergehalt

In der Theorie finden sich Begründungen sowohl für einen Anstieg als auch für ein Abnehmen des Wasserstoffgehaltes über den Wassergehalt des Brennstoffes. Einerseits spricht ein erhöhtes Wasserdampfangebot für vermehrten Umsatz zu Wasserstoff, andererseits kann ein geringeres Energieangebot bei höherer Feuchte die Produktion dieser energiereichen Komponente vermindern. Analoge Überlegungen gelten auch für die Methanentwicklung. Einer stofflich begünstigten Reformierungsreaktion steht deren energetische Hemmung entgegen.

Die Abweichungen zwischen Messung und Rechnung haben ihre Ursachen in den diskutierten Vereinfachungen zur Mathematischen Simulation. Von ihnen sollen diejenigen, die auf die Produktgaszusammensetzung einen sehr starken Einfluß haben, noch einmal aufgeführt und dahingehend diskutiert werden:

Totalumsatz von Koks

Da in der Rechnung ein Totalumsatz des Brennstoffes angenommen wurde, ergibt sich hier ein Fehlglied in der Kohlenstoffbilanz gegenüber der Realität, die durch den Austrag einer nicht zu vernachlässigenden Menge an Restkoks in der Asche gekennzeichnet ist.

Vereinfachung bei höheren Kohlenwasserstoffen

In der Berechnung werden die höheren Kohlenwasserstoffe (Teere) nahezu restlos in Permanentgase umgesetzt. Gleichzeitig wird in der Realität aufgrund der Vielzahl von Verbindungen eine nicht quantifizierte Menge der Elemente C, H, und O in den Trocknungsstufen vor der Gasanalyse abgetrennt und tritt damit im Meßergebnis nicht in Erscheinung.

Annahme adiabater Bedingungen

In der Realität wurde keine ideale Isolierung des Reaktors erreicht, wie sie in der Berechnung angenommen wurde. Die Verlustwärme im unteren Teil des Modellreaktors beeinflusst die Gaszusammensetzung am Austritt des Reaktors durch eine veränderte Lage des chemischen Gleichgewichtes.

Im nächsten Abschnitt folgen Diskussionen zu Rechenergebnissen, zu denen keine Versuchsdaten herangezogen werden konnten.

Abbildung 65 zeigt die Entwicklung der Austrittstemperatur des Produktgases in Abhängigkeit vom Wassergehalt des Brennstoffes. Durch den sich spezifisch verringerten Energiehaushalt fallen die Werte von etwa 700 °C auf etwa 600 °C ab.

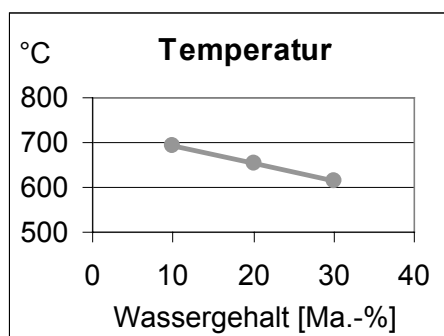


Abbildung 65 Austrittstemperatur über Wassergehalt

Der Energiehaushalt hat des weiteren Einfluß auf die Vergaserleistung bei Zufuhr einer gleichbleibenden Vergasungsluftmenge (Abbildung 67). Zwar steigt der Brennstoffmassenstrom stark von 12,6 kg/h auf 15,0 kg/h an. Dies entspricht jedoch einem Abfallen des Eintrages von enthaltenem Trockenbrennstoff von 11,3 kg/h auf 10,5 kg/h. Aufgrund des verminderten Heizwertes verringert sich die Feuerungswärmeleistung deutlich von 52,2 kW auf 45,9 kW. Ursächlich hierfür ist, daß der Luftsauerstoff bei einem erhöhten Wassereintrag aufgrund des gesteigerten

Oxidationsbedarfes für die Energiebereitstellung nur eine verringerte Menge an Brennstoff umsetzen kann.

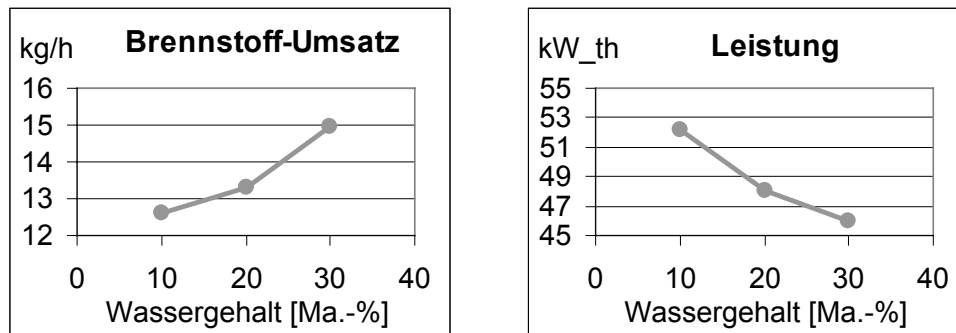


Abbildung 66 Vergaserleistung über Wassergehalt

Dies spiegelt sich in der Luftzahl Lambda wieder. Diese Kennzahl stellt das Verhältnis von eingesetzter Luftmenge zum Luftverbrauch bei exakt stöchiometrischem Umsatz dar und ist ein Indikator der Vergasung gegenüber der Verbrennung. Sie ist abhängig von der auftretenden Verlustwärme, dem Brennstoffheizwert, der Elementarzusammensetzung und der Vollständigkeit des Koks- und Teerumsatzes. Sie ist, entgegen dem Verhalten bei einer Verbrennung, dem Vergasungsprozeß nicht aufprägbar. In bisherigen Modellen mußte diese als Randbedingung vorgegeben werden, in der vorliegenden Arbeit ist sie dagegen als Rechenergebnis der Realität entsprechend eine Folge anderer Randbedingungen. Die Luftzahl steigt mit zunehmendem Brennstoff-Wassergehalt deutlich an (Abbildung 67). Mehr brennbare Bestandteile müssen zur Aufrechterhaltung des Prozesses oxidiert werden.

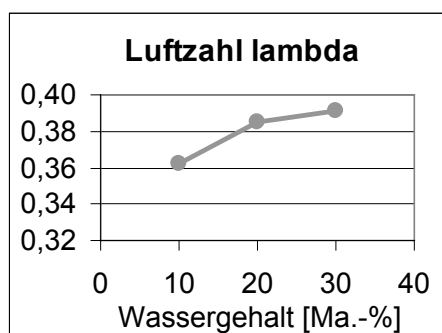


Abbildung 67 Luftzahl über Wassergehalt

5 ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Vorgehensweise in der Arbeit und Neuheitswert

Am Anfang der Arbeit wurde die Notwendigkeit der intensiven Forschung auf dem Gebiet der Festbettvergaser dargestellt. Sie begründete sich einerseits in einer Vielzahl von ökologischen und ökonomischen Motivationen, andererseits aber in dem nach wie vor nicht hinreichend vorhandenen Hintergrundwissen zum Prozeß. Aufgrund des hohen Aufwandes sowohl für experimentelle Forschung als auch für eine mathematischen Modellierung wurden bisher nur wenige Arbeiten angefertigt, welche die intensive mehrdimensionale Untersuchung der inneren Vorgänge der Festbettvergasung zum Ziel hatten.

Im Kapitel zur experimentellen Modellierung wurde die Vorgehensweise zur Versuchsgestaltung erläutert. Der Versuchsvergaser der TU Dresden erwies sich aufgrund seiner umfangreichen Meßmöglichkeiten und seinem Strömungsverhalten für diese Aufgabe als geeignet. Die Produkte wiesen für die Vergaserart übliche Werte auf.

Als neu in der Forschungslandschaft kann die Entnahme von Proben mit den angefertigten Gas- und Partikelsonden aus dem Inneren des Festbettvergasers und damit die Analyse von ein- und zweidimensionalen Profilen bezeichnet werden. Die Ergebnisse unterlagen prozeßbedingt insbesondere im Zentrum des Reaktors hohen Schwankungen.

Zur mathematischen Simulation wurde auf Basis eines kommerziell verfügbaren Strömungssimulationsprogrammes ein Werkzeug für die mehrdimensionale Nachbildung der Festbettvergasung geschaffen, welches durch Variation der Rand- und Nebenbedingungen auf veränderbare Anwendungen anpaßbar ist.

Die Vorgehensweise wurde ausführlich beschrieben, so daß der fachkundige Leser diese nach Erwerb des Basisprogrammes anwenden und darauf aufbauen kann. Parameter, die in bisherigen Arbeiten der Rechnungen als Bedingung vorgegeben werden mußten, konnten als variabel definiert werden und erscheinen nunmehr als Ergebnis. Als wichtiger Parameter sei die Luftzahl Λ genannt. Es war eine Reihe von Vereinfachungen notwendig. Zu nennen sind hier insbesondere die Wahl eines homogenen Partikels mit konstantem Durchmesser, die Behandlung



der Schüttung als Fluid, die Reduzierung auf ein einheitliches Produktspektrum von Pyrolyse und Teerkrackung sowie die Parameter zur Reaktionskinetik, welche in der Literatur sehr stark streuen. Trotz der Vielzahl der Einschränkungen wurde der Prozeß qualitativ und z.T. quantitativ gut nachgebildet.

Im Vergleich der experimentell gewonnenen Ergebnisse mit denen der mathematischen Simulation gelang die Darstellung der inneren Vorgänge im Reaktor und die Postulierung eines Gesamtreaktionsverhaltens. Damit konnte ein Beitrag zur Erhöhung der Prozeßtransparenz geleistet werden. Die Fähigkeiten des Simulationswerkzeuges zur Nachbildung des Prozesses wurden dabei belegt. Mit ihm konnten die Werte der limitierten Anzahl von Meßpunkten mit dem steten Verlauf des stärker aufgelösten Rechengitters ergänzt sowie die Bedeutung einzelner wichtiger physikalischer und chemischer Einflußgrößen durch Variation derselben diskutiert werden.

Obwohl Teer für die Technologie von hoher Bedeutung ist, konnten auf ihn leider nur quantitativ eingegangen werden.

In Tabelle 23 werden die wichtigsten Potenzen und Grenzen der Arbeit dargestellt.

Tabelle 23 Fortschritte und Einschränkungen in der Arbeit

| | Fortschritt  | Einschränkung  |
|-----------------------------|---|---|
| Experimentelle Modellierung | Messungen im Inneren eines Vergasungsreaktors | hohe Schwankungsbreite |
| Mathematische Modellierung | mehrdimensionale Simulation | hohe Anzahl von Vereinfachungen |

Erbrachte Transparenz

Es wurde die Verteilung der verschiedenen Gasspezies ermittelt. Gemeinsam mit dem Temperaturverlauf und dem Strömungsverhalten konnte auf eine Reaktionsabfolge geschlossen werden, die postuliert und näher beschrieben wurde.

Wesentliche Ergebnisse waren:

- Die Hochtemperaturzone ist örtlich, sowohl axial als auch radial, sehr begrenzt.
- Nach dem Vergasungslufteintritt folgt ein Bereich, in dem Kohlenmonoxid und Kohlendioxid dominieren. Dieser Zustand wurde darauf zurückgeführt, daß die Vergasungsluft nahezu ausschließlich mit pyrolysiertem Holz zur Reaktion gelangt und sich über das Boudouard-Gleichgewicht ein Zwischenzustand einstellt.
- Die gasförmigen Pyrolyseprodukte werden dagegen von der Hochtemperaturzone abgedrängt. Sie gelangen erst später durch Vermischungseffekte in der Schüttung in Kontakt und zur Reaktion mit der inneren Strömung, bei der es sich neben dem Luftstickstoff hauptsächlich um Kohlenmonoxid handelt. Dabei stellt sich die Austrittszusammensetzung ein.
- Es wurde der prinzipielle Mangel der untersuchten Vergaserart aufgezeigt. Dieser besteht darin, daß zwar eine Hochtemperaturzone vorhanden ist, diese für eine verbesserte Brenngasqualität aber nicht wirksam werden kann, da die zu krackenden Pyrolyseprodukte die Zone nicht durchströmen.
- Auf dem Weg der Pyrolyseprodukte herrschen zu geringe Temperaturen bei zu kurzen Verweilzeiten, weshalb die Produktion eines vollständig teerfreies Brenngases allein mit dieser Technologie als nicht möglich bewiesen wurde.

Auf der Basis des gewonnenen Wissens konnten die physikalisch möglichen Grenzwerte, insbesondere für die Maximaltemperatur, fundiert diskutiert werden.

Ausblick

Aufbauend auf der vorliegenden Arbeit ist eine Reihe interessanter weiterführender Forschungen denkbar. Insbesondere können auf Basis der erbrachten Transparenz und unter Nutzung des geschaffenen Simulationswerkzeuges im Rahmen von Industrieaufträgen gezielt Optimierungsmöglichkeiten von Vergaserentwicklungen untersucht werden.

Es ergeben sich folgende Ansatzpunkte zur weiteren wissenschaftlichen Bearbeitung der Vergasung:

Geometrische Reaktorgestaltung

Zur Untersuchung von Einflüssen der geometrischen Reaktorgestaltung ist der Versuchsvergaser aufgrund seines modularen Aufbaus in mehreren Schüssen grundsätzlich geeignet. Denkbar sind hier veränderte Luftzuführungen wie axiale Stufung oder eine zusätzliche wandseitige Zufuhr. Des weiteren sollten Möglichkeiten einer besseren Schüttungsbewegung durch Verzicht oder Verringerung der Verjüngung geprüft werden.

Für die mathematische Simulation ist ein neues Rechengitter entsprechend der veränderten Geometrie zu erstellen und die entsprechenden Randbedingungen, wie Ein- und Auslässe festzulegen. Hier bieten sich zudem Untersuchungen des für die Technologie wichtigen Scale-up-Verhaltens an.

Prozeßgestaltung

In einer parallelen Arbeit werden am Lehrstuhl bereits Optimierungen durch Prozeßumgestaltung und -kombination untersucht /29/. Dazu zählen die Einflüsse der Veränderung des Vergasungsmittels, wie z.B. eine Teilstrom-Rezirkulation.

Ein weiteres, zukünftig möglicherweise an Bedeutung gewinnendes, Forschungsfeld ist das Teillastverhalten des Reaktors unter besonderer Berücksichtigung der Dynamik. Denn Energie aus Biomasse nimmt, aufgrund ihres gegenüber Wind- und Solarenergie steuerbaren Einsatzes, innerhalb des Spektrums der regenerativen Energien eine Sonderstellung ein.

Die Integration einer Vorwärmung der Vergasungsluft mit der Abwärme des Brenngases ist ebenfalls eine zu untersuchende Option. Es sollte überprüft werden, inwieweit durch die Anhebung des Temperaturniveaus im Reaktor ein vermehrter Teerumsatzumsatz erreicht werden kann.

Untersuchung weiterer Brenn- und Abfallstoffe

Hierbei ist der Versuchsstand im wesentlichen unverändert nutzbar. Zur mathematischen Modellierung bedarf es hingegen einer Reihe von Anpassungen. Alle in die Rechnung eingehenden Rand- und Nebenbedingungen sowie die physikalischen und chemischen Modelle mit ihren Parametrierungen müssen

überprüft werden. Dies betrifft u.a. die Stoffzusammensetzungen und -eigenschaften, die Reaktionsregimes sowie die strömungsbeeinflussenden Parameter.

Verbesserung der Mathematischen Simulation

Es kann mit einer weiteren Soft- und Hardwareentwicklung gerechnet werden, welche die Potenzen der Mathematischer Modellierung erhöht. Schnellere Prozessoren und höhere Speicherkapazitäten lassen die Erhöhung der Zellzahl und damit den Übergang zur dreidimensionalen Simulation, eine signifikante Rechenzeitverkürzung oder die Berechnung instationärer Vorgänge zu. Softwareseitig ist eine fortschreitende Integration weiterer Möglichkeiten zu beobachten. Derzeit geschieht bereits die Einbindung von Mehrphasenströmungen. Für die Zukunft wurden umfangreiche Maßnahmenkataloge angekündigt, welche auch die vermehrte Einbindung von physikalische und chemische Wechselwirkungen zwischen Phasen betreffen.

Die bisherige Auswahl physikalischer und chemischer Modelle bedarf weiterer Bearbeitung. So sollten die Modelle entsprechend des speziellen Anwendungsfalles verbessert werden. Hierbei ist jedoch immer darauf zu achten, wo sich die genauigkeitslimitierenden Faktoren befinden.

Zur Bewertung der Untersuchungen bietet sich vor allem die erreichte Brenngasqualität an, welche ein Maß für den technologischen Erfolg des Prozesses darstellt. Hierzu zählt neben der Zusammensetzung der Permanentgase, die den Heizwert des Gases bestimmt, insbesondere die Belastung mit Teer, dessen Anteil es zu minimieren bzw. zu eliminieren gilt. Da in Zukunft für biogene Brennstoffe eher mit einem Preisanstieg zu rechnen ist, kommt dem Vergaserwirkungsgrad besondere Bedeutung zu. Er stellt somit eine wichtige Kenngröße für den wirtschaftlichen Erfolg dar.

Es sollte die Chance der gegenseitigen Befruchtung durch die parallele Nutzung von Experiment und mathematischer Modellierung genutzt werden.

6 ANLAGEN

Anlage 1 Partikelgeometrie von Vergleichsbrennstoffen

Bauabbruchholz grob, Espenhain [Ma.-%]

| | | Länge bis mm | | | | | Summe kum. | |
|---------------------|----|--------------|-------|-------|-------|--------|------------|--------|
| | | 50 | 100 | 200 | 300 | 400 | | |
| Breite bis mm | 5 | 3,47 | 5,45 | 2,50 | 0,72 | 0,05 | 12,19 | 12,19 |
| | 10 | 2,33 | 12,91 | 8,55 | 1,49 | 0,15 | 25,41 | 37,60 |
| | 20 | 2,77 | 15,11 | 13,50 | 4,33 | 0,47 | 36,19 | 73,79 |
| | 30 | 0,99 | 6,37 | 14,52 | 3,49 | 0,84 | 26,21 | 100,00 |
| Summe | | 9,56 | 39,83 | 39,06 | 10,03 | 1,51 | | |
| kumuliert | | 9,56 | 49,39 | 88,46 | 98,49 | 100,00 | | |

Bauabbruchholz mittel, Dresden [Ma.-%]

| | | Länge bis mm | | | | | Summe kum. | |
|---------------------|----|--------------|-------|-------|-------|-------|------------|-------|
| | | 15 | 30 | 45 | 60 | 100 | 200 | |
| Breite bis mm | 3 | 25,38 | 5,87 | 3,62 | 0,59 | 0,36 | 0,12 | 35,95 |
| | 5 | 3,93 | 4,46 | 8,56 | 4,01 | 2,94 | 0,55 | 24,45 |
| | 8 | 2,44 | 3,89 | 4,06 | 2,19 | 1,79 | 1,29 | 15,66 |
| | 10 | 0,00 | 1,59 | 2,12 | 1,40 | 3,00 | 1,25 | 9,35 |
| | 15 | 0,00 | 0,00 | 2,87 | 3,44 | 2,77 | 1,72 | 10,79 |
| | 20 | 0,00 | 0,00 | 1,64 | 0,87 | 0,68 | 0,62 | 3,80 |
| Summe | | 31,76 | 15,80 | 22,88 | 12,50 | 11,53 | 5,54 | |
| kumuliert | | 31,76 | 47,55 | 70,43 | 82,93 | 94,46 | 100,00 | |

Holzhackschnitzel Sägewerk Zwönitz - Versuchsbrennstoff [Ma.-%]

| | | Länge bis mm | | | | | Summe kum. | |
|---------------------|----|--------------|-------|-------|-------|--------|------------|--------|
| | | 5 | 15 | 30 | 45 | 60 | | |
| Breite bis mm | 5 | 5,52 | 1,38 | 38,51 | 1,08 | 0,41 | 46,91 | 46,91 |
| | 10 | 0,00 | 12,15 | 26,99 | 7,55 | 0,60 | 47,29 | 94,20 |
| | 20 | 0,00 | 0,00 | 2,74 | 3,06 | 0,00 | 5,80 | 100,00 |
| | 30 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 100,00 |
| Summe | | 5,52 | 13,53 | 68,25 | 11,68 | 1,01 | | |
| kumuliert | | 5,52 | 19,05 | 87,30 | 98,99 | 100,00 | | |

Holzhackschnitzel Verschnitt Adorf [Ma.-%]

| | | Länge bis mm | | | | | Summe kum. | |
|---------------------|----|--------------|-------|-------|-------|-------|------------|-------|
| | | 5 | 15 | 30 | 45 | 60 | 100 | |
| Breite bis mm | 5 | 4,57 | 31,40 | 4,99 | 0,83 | 0,68 | 0,80 | 43,26 |
| | 10 | 0,00 | 11,35 | 20,28 | 2,34 | 1,42 | 2,31 | 37,71 |
| | 20 | 0,00 | 0,00 | 7,53 | 4,31 | 1,57 | 5,63 | 19,04 |
| | 30 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Summe | | 4,57 | 42,75 | 32,80 | 7,48 | 3,67 | 8,74 | |
| kumuliert | | 4,57 | 47,31 | 80,11 | 87,59 | 91,26 | 100,00 | |

Pellet [Ma.-%]

| Breite bis mm | Länge bis mm | | | | | Summe kum. | |
|---------------------|--------------|-------|-------|-------|-------|------------|-------|
| | | 5 | 12 | 20 | 30 | 50 | |
| | 12 | 2,55 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 2,55 |
| | 12 | 8,79 | 23,05 | 31,31 | 26,77 | 7,52 | 97,45 |
| Summe | | 11,35 | 23,05 | 31,31 | 26,77 | 7,52 | |
| kumuliert | | 11,35 | 34,40 | 65,70 | 92,48 | 100,00 | |

Anlage 2 Meßwerte der Partikelanalysen

Wassergehalt

| Höhe | Messung Ma.-% | | | | | | | Mittelwert |
|-------|------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | |
| 1 | 2,2 | 3,1 | 3,1 | 2,7 | 2,2 | 1,6 | 9,3 | 3,5 |
| 2 | 2,0 | 2,1 | 1,4 | 2,6 | 1,1 | 0,8 | 1,6 | 1,6 |
| 3 | 1,2 | 1,5 | 2,0 | 0,4 | 0,4 | 0,4 | 0,5 | 0,9 |
| Asche | 1,1 | 1,5 | 1,4 | 3,0 | 0,9 | 1,4 | 1,1 | 1,5 |

Flüchtigengehalt

| Höhe | Messung Ma.-% | | | | | | | Mittelwert |
|-------|------------------|------|------|------|------|------|------|------------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | |
| 1 | 27,7 | 30,0 | 30,0 | 25,3 | 39,8 | 36,4 | 28,4 | 31,1 |
| 2 | 3,4 | 3,9 | 8,0 | 5,1 | 4,1 | 3,3 | 7,0 | 5,0 |
| 3 | 4,8 | 6,9 | 5,7 | 5,8 | 2,8 | 2,5 | 3,7 | 4,6 |
| Asche | 7,5 | 10,0 | 7,8 | 19,1 | 9,2 | 7,7 | 5,6 | 9,6 |

Aschegehalt

| Höhe | Messung Ma.-% | | | | | | | Mittelwert |
|-------|------------------|------|------|------|------|------|------|------------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | |
| 1 | 5,4 | 2,6 | 2,6 | 2,3 | 2,7 | 1,8 | 1,4 | 2,7 |
| 2 | 10,8 | 7,2 | 15,0 | 9,0 | 14,6 | 6,4 | 3,2 | 9,5 |
| 3 | 20,1 | 17,0 | 12,0 | 20,3 | 33,5 | 34,5 | 27,6 | 23,6 |
| Asche | 23,5 | 24,0 | 15,5 | 24,2 | 37,3 | 54,8 | 39,2 | 31,2 |

Anlage 3 Ergebnisse zu den Gasprofilen

Temperatur

| Höhe | Rechnung °C | | | | Mittelwert Messung °C | | | | rel. Standardabweichung Messung % | | | |
|------|------------------------|-----|------|-----|-----------------------------|-----|-----|------|---|------|------|------|
| | radial (1) => Wand (2) | | | | | | | | | | | |
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | 155 | 667 | 1234 | 453 | 476 | 685 | 910 | 1067 | 68,5 | 42,7 | 35,7 | 29,0 |
| 2 | 563 | 784 | 981 | 981 | 587 | 710 | 813 | 850 | 29,5 | 16,5 | 16,5 | 21,4 |
| 3 | 643 | 695 | 774 | 801 | 430 | 617 | 678 | 720 | 44,6 | 18,0 | 16,4 | 14,5 |
| 4 | 660 | 667 | 682 | 698 | 382 | 497 | 518 | 509 | 42,9 | 30,6 | 29,9 | 24,5 |

O₂ - Sauerstoff

| Höhe | Rechnung Vol.-%_tr | | | | Mittelwert Messung Vol.-%_tr | | | | rel. Standardabweichung Messung % | | | |
|------|------------------------|-----|-----|------|------------------------------------|-----|-----|-----|---|-------|-------|-------|
| | radial (1) => Wand (2) | | | | | | | | | | | |
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 14,1 | 1,7 | 1,9 | 3,2 | 7,9 | 97,2 | 141,9 | 102,1 | 91,7 |
| 2 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,7 | 0,6 | 0,2 | 0,2 | 122,2 | 93,1 | 31,3 | 91,5 |
| 3 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,9 | 0,4 | 0,2 | 0,3 | 143,1 | 111,2 | 93,4 | 86,1 |
| 4 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 1,2 | 0,6 | 0,5 | 0,4 | 94,1 | 167,4 | 110,6 | 127,5 |

CO - Kohlenmonoxid

| Höhe | Rechnung Vol.-%_tr | | | | Mittelwert Messung Vol.-%_tr | | | | rel. Standardabweichung Messung % | | | |
|------|------------------------|------|------|------|------------------------------------|------|------|------|---|------|------|------|
| | radial (1) => Wand (2) | | | | | | | | | | | |
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | 16,4 | 18,1 | 18,0 | 3,5 | 17,5 | 20,5 | 20,3 | 11,9 | 39,8 | 31,7 | 32,5 | 98,7 |
| 2 | 19,9 | 21,6 | 24,2 | 24,2 | 24,6 | 23,9 | 28,1 | 29,5 | 10,4 | 19,6 | 16,3 | 11,2 |
| 3 | 21,1 | 21,5 | 22,4 | 22,8 | 22,3 | 23,9 | 24,7 | 26,3 | 16,4 | 21,7 | 22,2 | 14,9 |
| 4 | 21,4 | 21,4 | 21,5 | 21,6 | 22,2 | 24,6 | 24,2 | 24,4 | 17,5 | 13,8 | 12,2 | 12,3 |

CO₂ - Kohlendioxid

| Höhe | Rechnung Vol.-%_tr | | | | Mittelwert Messung Vol.-%_tr | | | | rel. Standardabweichung Messung % | | | |
|------|------------------------|------|------|-----|------------------------------------|-----|-----|-----|---|------|------|-------|
| | radial (1) => Wand (2) | | | | | | | | | | | |
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | 11,8 | 12,0 | 11,1 | 4,6 | 10,3 | 8,5 | 7,5 | 4,4 | 41,9 | 49,3 | 67,7 | 105,2 |
| 2 | 10,7 | 9,6 | 7,5 | 7,5 | 6,8 | 7,7 | 4,9 | 4,1 | 31,4 | 50,4 | 66,9 | 86,7 |
| 3 | 10,1 | 9,8 | 9,2 | 8,9 | 9,3 | 7,4 | 7,5 | 6,1 | 18,4 | 49,6 | 59,4 | 59,6 |
| 4 | 10,0 | 10,0 | 9,9 | 9,8 | 9,3 | 7,8 | 8,3 | 8,1 | 17,7 | 16,3 | 13,3 | 23,9 |

H₂ - Wasserstoff

| Höhe | Rechnung Vol.-%_tr | | | | Mittelwert Messung Vol.-%_tr | | | | rel. Standardabweichung Messung % | | | |
|------|------------------------|------|------|------|------------------------------------|------|------|------|---|------|------|-------|
| | radial (1) => Wand (2) | | | | | | | | | | | |
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | 6,7 | 8,0 | 7,5 | 1,3 | 5,5 | 6,9 | 5,2 | 1,1 | 30,1 | 54,3 | 58,9 | 275,9 |
| 2 | 8,0 | 9,4 | 9,1 | 9,1 | 9,9 | 11,8 | 11,3 | 11,2 | 20,0 | 23,7 | 30,6 | 44,6 |
| 3 | 10,5 | 11,1 | 12,1 | 12,3 | 9,6 | 10,3 | 12,1 | 11,4 | 23,3 | 19,9 | 19,0 | 22,5 |
| 4 | 12,4 | 12,5 | 12,7 | 12,9 | 10,3 | 11,6 | 12,4 | 11,7 | 19,5 | 16,6 | 15,4 | 11,8 |

CH₄ - Methan

| Höhe | Rechnung | | | | Mittelwert | | | | rel. Standardabweichung | | | |
|------------------------|-----------|-----|-----|-----|------------|-----|-----|-----|-------------------------|------|-------|-------|
| | Vol.-%_tr | | | | Messung | | | | Messung | | | |
| | Vol.-%_tr | | | | Vol.-%_tr | | | | % | | | |
| radial (1) => Wand (2) | | | | | | | | | | | | |
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | 6,6 | 6,1 | 1,1 | 0,0 | 1,7 | 1,9 | 1,4 | 0,2 | 62,5 | 58,4 | 101,2 | 631,5 |
| 2 | 4,7 | 3,0 | 1,1 | 1,1 | 1,5 | 1,7 | 0,9 | 1,1 | 53,0 | 54,9 | 75,5 | 111,8 |
| 3 | 3,3 | 2,8 | 1,9 | 1,5 | 2,3 | 1,5 | 1,8 | 1,5 | 20,2 | 66,1 | 68,7 | 72,2 |
| 4 | 2,5 | 2,5 | 2,3 | 2,2 | 2,3 | 2,0 | 2,2 | 2,0 | 16,4 | 30,0 | 17,8 | 36,5 |

Anlage 4 Rechenergebnisse Brennstoffvariation

| | | | Rechnung | | |
|----|---------------------------|------------------|----------|---------|---------|
| fo | Wassergehalt | Ma.-% | 10 | 20 | 30 |
| fo | Brennstoffmassenstrom | g/s | 3,498 | 3,824 | 4,157 |
| g4 | Vergasungsluftmassenstrom | g/s | 6,830 | 6,830 | 6,830 |
| g6 | Brenngasmassenstrom | g/s | -10,398 | -10,724 | -11,057 |
| g6 | CO | Vol.-%_tr | 24,7 | 23,0 | 21,0 |
| g6 | CO ₂ | Vol.-%_tr | 7,9 | 9,0 | 10,2 |
| g6 | H ₂ | Vol.-%_tr | 14,7 | 13,7 | 12,2 |
| g6 | CH ₄ | Vol.-%_tr | 1,29 | 1,73 | 2,18 |
| g6 | N ₂ | Vol.-%_tr | 51,4 | 52,6 | 54,4 |
| g6 | T _{aus} | °C | 694,1 | 653,1 | 614,5 |
| | Leistung | kW _{th} | 52,2 | 49,7 | 45,9 |
| | Lambda | | 0,362 | 0,372 | 0,391 |

Anlage 5 Bilanzprüfungen zur Mathematischen Simulation mittels Tabellenkalkulation

Massenbilanz

| | | | | Massen-Bilanz |
|-------------------|-----------------------|----------------|----------------|----------------------|
| | Medium | Massenst | Stoff | Massenanteil |
| | | g/s | | Ma.-% |
| fo | Holz | 3,718 | Sum/Mit | 100,000 |
| | | | Holz tr. | 80,000 |
| | | | Holzfeu | 20,000 |
| | | | Koks | 0,000 |
| g0 | N2, Stabilität | 0,070 | Sum/Mit | 100,000 |
| g5 | Luft | 6,830 | Sum/Mit | 100,000 |
| g6 | BG | -10,661 | Sum/Mit | 99,997 |
| | | | O2 | 0,000 |
| | | | CO | 20,275 |
| | | | CO2 | 14,766 |
| | | | H2 | 0,866 |
| | | | H2O | 12,390 |
| | | | CH4 | 1,277 |
| | | | Teer | 0,013 |
| | | | N2 | 50,410 |
| Summe EIN | | 10,618 | absolut | |
| Summe AUS | | -10,661 | absolut | |
| Summe | | -0,043 | absolut | |
| rel.zu EIN | | -0,40 | % | |

Der Luftmassenstrom (g5) sowie ein geringer Stickstoffstrom im oberen Teil (g0 - zur Stabilisierung der Rechnung) wurde dem Programm vorgegeben. Der Holzverbrauch (f0) sowie die Menge an produzierten Brenngas (g6) geben dagegen Rechenergebnisse wieder. Die Gesamtbilanz hat einen Fehlbetrag von 0,40 %.

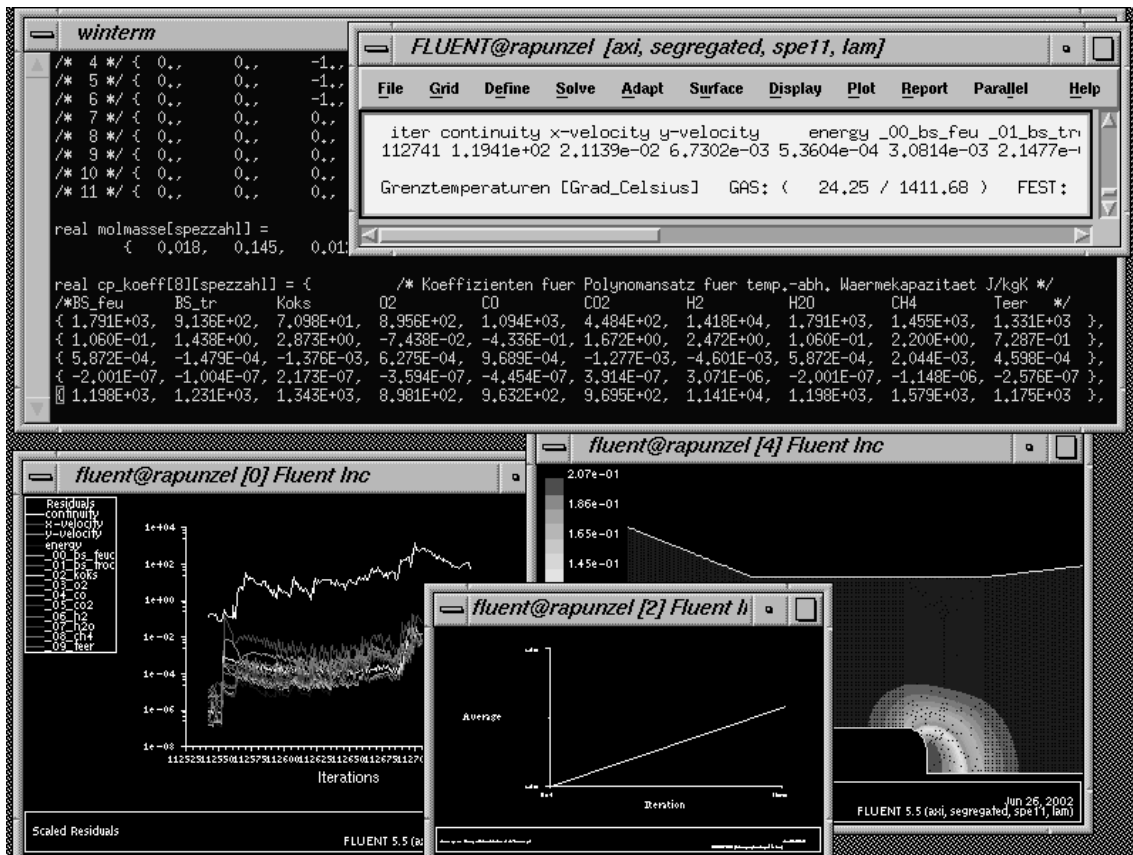
(Mol-) Elementarbilanz

| | | | Mol-Bilanz | | | |
|------------|----------------|----------|------------|--------|--------|--------|
| | Medium | Stoff | mol/s | | | |
| | | | C | H | O | N |
| fo | Holz | Sum/Mit | 123,1 | 267,2 | 123,4 | 0,0 |
| | | Holz tr. | 123,1 | 184,6 | 82,1 | |
| | | Holzfeu | 0,0 | 82,6 | 41,3 | |
| | | Koks | 0,0 | 0,0 | 0,0 | |
| g0 | N2, Stabilität | Sum/Mit | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 5,0 |
| g5 | Luft | Sum/Mit | 0,0 | 0,0 | 98,2 | 375,7 |
| g6 | BG | Sum/Mit | -121,5 | -273,3 | -222,2 | -383,9 |
| | | O2 | 0,0 | | 0,0 | |
| | | CO | -77,2 | | -77,2 | |
| | | CO2 | -35,8 | | -71,6 | |
| | | H2 | | -92,3 | | |
| | | H2O | | -146,8 | -73,4 | |
| | | CH4 | -8,5 | -34,0 | | |
| | | Teer | 0,0 | -0,1 | -0,1 | 0,0 |
| | | N2 | | | | -383,9 |
| Summe EIN | | absolut | 123,1 | 267,2 | 221,5 | 380,7 |
| Summe AUS | | absolut | -121,5 | -273,3 | -222,2 | -383,9 |
| Summe | | absolut | 1,6 | -6,0 | -0,7 | -3,2 |
| rel.zu EIN | | % | 1,27 | -2,25 | -0,29 | -0,85 |

Energiebilanz

| | | | Enthalpie-Bilanz | | | |
|-------------------|-----------------------|----------------|-------------------------|--------------|---------------|---------------|
| | Medium | Stoff | Temperatur | fühlbar | Reaktion | Summe |
| | | | °C | W | W | W |
| fo | Holz | Sum/Mit | 25,0 | 0 | 48296 | 48296 |
| | | Holz_tr. | | 0 | 50155 | 50155 |
| | | Holzfeu | | 0 | -1859 | -1859 |
| | | Koks | | 0 | 0 | 0 |
| g0 | N2, Stabilität | Sum/Mit | 25,0 | 0 | 0 | 0 |
| g5 | Luft | Sum/Mit | 25,0 | 0 | 0 | 0 |
| g6 | BG | Sum/Mit | 676,1 | -9382 | -38920 | -48302 |
| | | O2 | | 0 | | 0 |
| | | CO | | -1545 | -21615 | -23160 |
| | | CO2 | | -1097 | | -1097 |
| | | H2 | | -885 | -10617 | -11502 |
| | | H2O | | -1758 | | -1758 |
| | | CH4 | | -296 | -6679 | -6975 |
| | | Teer | | -1 | -8 | -9 |
| | | N2 | | -3800 | | -3800 |
| Summe EIN | | | absolut | 0 | 48296 | 48296 |
| Summe AUS | | | absolut | -9382 | -38920 | -48302 |
| Summe | | | absolut | -9382 | 9376 | -6 |
| rel.zu EIN | | | % | | | -0,01 |

Anlage 6 Bildschirm Ausdruck Basis- und Unterprogramm



Der Bildschirmausdruck zeigt im oberen Teil die grafische Benutzeroberfläche des Basisprogrammes zum Aufruf der Dialogfelder und im Hintergrund den vi-Texteditor zur Erstellung des Unterprogrammes.

Im unteren Teil sind Auswertefenster dargestellt. Dabei handelt es sich von links nach rechts um den zeitlichen Verlauf der Residuen (Konvergenz) und eines ausgewählten Parameters an einem ausgewählten Ort (hier CO-Gehalt am Austritt) sowie die Darstellung eines Profiles (hier Ausschnitt der Reaktionsrate der Koksoxidation).

Anlage 7 Rand- und Nebenbedingungen Fluent

FLUENT

Version: axi, segregated, spell, lam

(axi, segregated, 11 species, laminar)

Release: 5.5.14

Title:

Models

| Model | Settings |
|-------------------|---------------------------|
| ----- | |
| Space | Axisymmetric |
| Time | Steady |
| Viscous | Laminar |
| Heat Transfer | Enabled |
| Radiation | None |
| Species Transport | Non-Reacting (11 species) |

Boundary Conditions

Zones

| name | id | type |
|----------------------|-----|-----------------|
| ----- | | |
| g (Gebiet Gas) | 1 | fluid |
| f (Gebiet Schüttung) | 2 | fluid |
| g5 (Vergasungsluft) | 8 | mass-flow-inlet |
| g0 (für Stabilität) | 3 | mass-flow-inlet |
| f0 (Brennstoff) | 15 | pressure-inlet |
| g6 (Brenngas) | 9 | pressure-outlet |
| g..., f... (Wände) | ... | symmetry |
| default-interior | 20 | interior |
| default-interior:019 | 19 | interior |

```

g (Strömungsgebiet Gas)
  ((mass (profile udf Masse_GAS)
    (x-momentum (profile udf Impuls_axial)
    (y-momentum (profile udf Impuls_radial)
    (energy (profile udf Energie_GAS)
    (species-0...2 (constant . 0)
    (species-3 (profile udf Quelle_O2)
    (species-4 (profile udf Quelle_CO)
    (species-5 (profile udf Quelle_CO2)
    (species-6 (profile udf Quelle_H2)
    (species-7 (profile udf Quelle_H2O)
    (species-8 (profile udf Quelle_CH4)
    (species-9 (profile udf Quelle_Teer)

f (Strömungsgebiet Schüttung)
  ((mass (profile udf Masse_FEST) (constant . 0))
  (x-momentum (constant . 0) (profile ))
  (y-momentum (constant . 0) (profile ))
  (energy (profile udf Energie_FEST) (constant . 0))
  (species-0 (profile udf Quelle_BS_feucht)
  (species-1 (profile udf Quelle_BS_trocken)
  (species-2 (profile udf Quelle_Koks)
  (species-3...9 (constant . 0)
  Porous zone?                yes
  Resistance      1e+12

g5 (Einlaß Vergasungsluft)
  Mass Flow Specification Method      0
  Mass Flow-Rate                      0.00683
  Mass Flux                          1
  Total Temperature                   298.15
  Supersonic/Initial Gauge Pressure  0
  Direction Specification Method      1
  Axial-Component of Flow Direction  1
  Radial-Component of Flow Direction  0
    (species-3 (constant . 0.23)
    (species-0...2, 4...8 (constant . 0)

```


g0 (Erhöhung der Rechenstabilität im oberen Teil)

| | |
|------------------------------------|--------|
| Mass Flow Specification Method | 0 |
| Mass Flow-Rate | 7e-05 |
| Mass Flux | 1 |
| Total Temperature | 298.15 |
| Supersonic/Initial Gauge Pressure | 0 |
| Direction Specification Method | 1 |
| Axial-Component of Flow Direction | 1 |
| Radial-Component of Flow Direction | 0 |

f0 (Einlaß Brennstoff)

| | |
|------------------------------------|--------|
| Gauge Total Pressure | 0 |
| Supersonic/Initial Gauge Pressure | 0 |
| Total Temperature | 298.15 |
| Direction Specification Method | 1 |
| Axial-Component of Flow Direction | 1 |
| Radial-Component of Flow Direction | 0 |
| X-Component of Axis Direction | 1 |
| Y-Component of Axis Direction | 0 |
| Z-Component of Axis Direction | 0 |
| X-Coordinate of Axis Origin | 0 |
| Y-Coordinate of Axis Origin | 0 |
| Z-Coordinate of Axis Origin | 0 |
| (species-0 (constant . 0.2) | |
| (species-1 (constant . 0.8) | |
| (species-2...8 (constant . 0) | |

g6 (Auslaß Brenngas)

| | |
|----------------------------|--------|
| Gauge Pressure | 0 |
| Backflow Total Temperature | 298.15 |

Material Properties

Material: vergasung (mixture)

| | | | |
|---|--------|--------------------------------|--|
| Mixture Species | | names | |
| ((_00_bs_feucht _01_bs_trocken _02_koks _03_o2 _04_co | | | |
| _05_co2 _06_h2 _07_h2o _08_ch4 _09_teer _10_n2) () | | | |
| Density | kg/m3 | volume-weighted-mixing-law | |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | mixing-law | |
| Thermal Conductivity | w/m-k | user-defined (Waermeleitung) | |
| Viscosity | kg/m-s | user-defined (dyn_Viskositaet) | |
| Mass Diffusivity | m2/s | user-defined (Diff_Misch) | |
| Thermal Expansion Coefficient | 1/k | constant | |

Material: _00_bs_feucht (fluid)

| | | | |
|--|----------|--------------|--------------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_BS_feucht) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 1791 0.106 0.00058719999 -2.001e-07) | | | |
| (1100-3000: 1198 1.426 -0.00037590001 3.724e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 18 |

Material: _01_bs_trocken (fluid)

| | | | |
|---|----------|--------------|---------------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_BS_trocken) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 913.59998 1.438 -0.00014790001 -1.004e-07) | | | |
| (1100-3000: 1231 1.219 -0.0003549 3.8650001e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 145 |

Material: _02_koks (fluid)

| | | | |
|---|----------|--------------|---------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_Koks) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 70.980003 2.8729999 -0.001376 2.173e-07) | | | |
| (1100-3000: 1343 0.68019998 -0.0002005 2.3629999e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 12 |

Material: _03_sauerstoff (fluid)

| | | | |
|--|----------|--------------|-------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_O2) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 895.59998 -0.074380003 0.00062750001 -3.5939999e-07) | | | |
| (1100-3000: 898.09998 0.21430001 -3.5720001e-05 4.5279999e-10) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 32 |

Material: _04_kohlenmonoxid (fluid)

| | | | |
|---|----------|--------------|-------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_CO) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 1094 -0.43360001 0.00096889999 -4.4539999e-07) | | | |
| (1100-3000: 963.20001 0.3251 -0.0001038 1.203e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 28 |

Material: _05_kohlendioxid (fluid)

| | | | |
|---|----------|--------------|--------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_CO2) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 448.39999 1.6720001 -0.0012769999 3.9139999e-07) | | | |
| (1100-3000: 969.5 0.39430001 -0.000126 1.466e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 44 |

Material: _06_wasserstoff (fluid)

| | | | |
|--|----------|--------------|-------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_H2) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 14180 2.4719999 -0.0046009999 3.071e-06) | | | |
| (1100-3000: 11410 4.2319999 -0.00081549998 6.57e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 2 |

Material: _07_wasserdampf (fluid)

| | | | |
|--|----------|--------------|--------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_H2O) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 1791 0.106 0.00058719999 -2.001e-07) | | | |
| (1100-3000: 1198 1.426 -0.00037590001 3.724e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 18 |

Material: _08_methan (fluid)

| | | | |
|--|----------|--------------|--------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_CH4) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 1455 2.2 0.002044 -1.148e-06) | | | |
| (1100-3000: 1579 4.1729999 -0.001294 1.44e-07) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 16 |

Material: _09_teer (fluid)

| | | | |
|--|----------|--------------|---------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_Teer) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 1331 0.72869998 0.00045980001 -2.5759999e-07) | | | |
| (1100-3000: 1175 1.4859999 -0.0004314 4.6090001e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 48.5 |

Material: _10_stickstoff (fluid)

| | | | |
|--|----------|--------------|-------------|
| Density | kg/m3 | user-defined | (Dichte_N2) |
| Cp (Specific Heat) | j/kg-k | polynomial | |
| (0-1100: 1100 -0.44819999 0.00091960002 -4.046e-07) | | | |
| (1100-3000: 931.79999 0.34099999 -0.0001064 1.205e-08) | | | |
| Molecular Weight | kg/kgmol | constant | 28 |

Relaxation

| | |
|----------------|------|
| Pressure | 0.01 |
| Momentum | 0.1 |
| Energy | 0.9 |
| _00_bs_feucht | 0.9 |
| _01_bs_trocken | 0.9 |
| _02_koks | 0.9 |
| _03_o2 | 0.9 |
| _04_co | 0.9 |
| _05_co2 | 0.9 |
| _06_h2 | 0.9 |
| _07_h2o | 0.9 |
| _08_ch4 | 0.9 |
| _09_teer | 0.9 |
| Density | 0.8 |
| Body Forces | 0.5 |

Numerics (Standard-Einstellungen)

Linear Solver (Standard-Einstellungen)

Discretization Scheme (Standard-Einstellungen)

Solution Limits

| Quantity | Limit |
|---------------------------|---------|
| ----- | |
| Minimum Absolute Pressure | 1 |
| Maximum Absolute Pressure | 5000000 |
| Minimum Temperature | 280 |
| Maximum Temperature | 2500 |

7 LITERATUR

- /1/ ASUE Daten und Faktensammlung zur Energiegewinnung aus Restholz, Verlag Rationeller Energieeinsatz, Hamburg 1996
- /2/ Adkins, P. W.: Physikalische Chemie, Verlag VCH Weiheim 1996
- /3/ Baerns, M.; Hofmann, H., Renken, A.: Chemische Reaktionstechnik - Lehrbuch der Technischen Chemie; Band 1, Thieme, Stuttgart New York, 1999
- /4/ Bernstein, W.; Hiller, A.; Schneider M.: Abschlussbericht Vergasungsverfahren für Althölzer mit motorischer Prozessgasnutzung, TU Dresden - Institut für Energietechnik 2001
- /5/ Blazej: Chemie des Holzes, VEB Fachbuchverlag Leipzig 1979
- /6/ Born, M.: Grundlagen der Vergasung von Abfällen, Verfahren und Prozeßführung in Born/Berghoff: Vergasung für die Entsorgung von Abfällen, Springer-VDI-Verlag Düsseldorf 1998
- /7/ Brandt, F.: Wärmeübertragung in Dampferzeugern und Wärmeaustauschern, Vulkan-Verlag, Essen 1985
- /8/ Braunschädel, W.: Schwelende Verbrennung und Übergang zur Entflammung, Fortschr.-Ber. VDI-Reihe 3 Nr. 301, VDI-Verlag Düsseldorf 1992
- /9/ Bundesrepublik Deutschland: Erneuerbare-Energien-Gesetz (EEG), 2000
- /10/ Bünger, H.: Die heterogene katalysierte Spaltung verschiedener Kohlenwasserstoffe durch partielle Verbrennung, Dissertation, Darmstadt 1982
- /11/ Casey, M.V.; Wintergerst, T.; Hutton, A.G.: Qualität und Glaubwürdigkeit in industriellen CFD-Simulationen, VDI-GET-Workshop Computersimulation von Strömungen und Wärmetransportprozessen in der Energietechnik, Düsseldorf 2001
- /12/ Dittmann, A.; Fischer, S.; Huhn, J.; Klinger, J.: Repetitorium der Technischen Thermodynamik, Teubner, Stuttgart 1995
- /13/ Dreiner, K.: Holz als umweltfreundlicher Energieträger: Nutzen-Kosten-Untersuchung, BMELF-Heft 432, Landwirtschaftsverlag Münster 1994
- /14/ Dubbel - Taschenbuch für den Maschinenbau, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1995
- /15/ Faulstich, M.: Rückstände aus der Müllverbrennung, EF-Verlag Berlin 1993
- /16/ Flaig, H.: Biomasse - nachwachsende Energie - Potentiale, Technik, Kosten, Expert-Verlag Renningen-Malmsheim
- /17/ Fluent Inc.: Users Guide

- /18/ Funk, G.; Krumm, W.: Mathematische Modellierung eines Festbettvergaser als Bestandteil einer Anlage zur dezentralen Nutzung von Biomasse in DGMK-Tagungsbericht Energetische Nutzung von Biomassen, Vehlen/Westf. 2000
- /19/ Gonschorek, S.: Überarbeitung und Anwendung des Fortran-Programms zur Vergaser-Simulation, TU Dresden - Institut für Energietechnik 2001, unveröffentlicht
- /20/ Görner, K.: Techn. Verbrennungssysteme, Springer-Verlag Berlin 1991
- /21/ Grassmann, P.; Widmer, F.: Einführung in die thermische Verfahrenstechnik, Walter de Gruyter Verlag, Berlin New York 1974
- /22/ Grundmann, R.: Numerische Methoden (CFD), Lehrbrief TU Dresden 2000
- /23/ Gumz, Wilhelm: Vergasung fester Brennstoffe, Stoffbilanz und Gleichgewicht, Springer-Verlag Berlin 1952
- /24/ Haidan, A.: Modellierung der Stoff- und Energiebilanzen des HTV-Juch-Vergaser sowie Betrachtungen zu den Strömungsverhältnissen, Großer Beleg Nr. 695 am Inst. für Energietechnik, TU Dresden 1999
- /25/ Hamel, S.: Mathematische Modellierung und experimentelle Untersuchung der Vergasung verschiedener fester Brennstoffe in atmosphärischen und druckaufgeladenen stationären Wirbelschichten, Dissertation Universität Siegen 2001
- /26/ Hammerer, D.; Reetz, B.: Biomasse-Festbettvergaser und Gasreinigung: Biomassefachgespräch 4.Dez.2000 TU-Wien
- /27/ Heitmann, H.-G.: Praxis der Kraftwerk-Chemie, Vulkan-Verlag Essen 1997
- /28/ Hiller, A.; Klemm, M.: Versuchsberichte Durchführung von 150h-Versuchen, TU Dresden - Institut für Energietechnik 1998, 1999, 2000
- /29/ Hiller, A.: TU Dresden - Institut für Energietechnik, Dissertation unveröffentlicht
- /30/ Huhn, J.: Umdrucke Thermodynamik - Wärmeübertragung, TU Dresden
- /31/ Jess, A.; Depner, H.: Thermische und katalytische Aufarbeitung von Rohgasen der Vergasung und Verkokung fester Brennstoffe, Chem. Ing. Tech. (69) 7/97
- /32/ Jüntgen, H.; van Heek, K. H.: Kohlevergasung, Grundlagen und technische Anwendung, Verlag Karl Thieme München 1981
- /33/ Juch, P.: Energiezentrum Espenhain - Holzvergasung mit motorischer Nutzung in Born/Berghoff: Vergasung für die Entsorgung von Abfällen, Springer-VDI-Verlag Düsseldorf 1998

- /34/ Klemm, M.: TU Dresden - Institut für Energietechnik, Dissertation unveröffentlicht
- /35/ Klose, W.; Jensen, S.; Modellierung eines indirekt beheizten Röhrenreaktors zur Vergasung stark wasserhaltiger Biomassen in DGMK-Tagungsbericht Energetische Nutzung von Biomassen, Vehlen/Westf. 2000
- /36/ Kollmann, F.: Technologie des Holzes und der Holzwerkstoffe, Erster Band: Anatomie und Pathologie, Chemie, Physik, Elastizität und Festigkeit, Springer-Verlag Berlin 1951
- /37/ Kubessa, M.: Holzvergasungsanlage mit Blockheizkraftwerk im Biomasse-Verwertungszentrum Espenhain, in Fachtagung „Holzvergasung - Teil der Strategie zur CO₂-Minderung“ Elsterwerda 2000
- /38/ Lang, G.: Reaktionskinetik - Studienbücher Chemie, Diesterweg Frankfurt am Main 1990
- /39/ Langhof, A.: Vergasung von Biomasse in einem Festbettreaktor im Gleichstrom, Interdisziplinäre Projektarbeit, TU Dresden am Inst. für Energietechnik, 2001
- /40/ Lohmann, Th. W.: Modellierung und Identifizierung der Reaktionskinetik der Kohlepyrolyse, Fortschr.-Ber. VDI-Reihe 3 Nr. 499, VDI-Verlag Düsseldorf 1997
- /41/ Meyer, B.: Grundlagen der Vergasung von Abfällen in Born/Berghoff: Vergasung für die Entsorgung von Abfällen, Springer-VDI-Verlag Düsseldorf 1998
- /42/ Molerus, O.: Schüttgutmechanik - Grundlagen und Anwendungen in der Verfahrenstechnik, Springer-Verlag Berlin 1985
- /43/ Morf, P.; Nussbaumer, Th.: Grundlagen zur Teerbildung bei der Holzvergasung, Zwischenbericht, Bundesamt für Energie der Schweiz, 1998
- /44/ Netz, H.; Wagner, W.: Betriebshandbuch Wärme, Verlag Dr. Ingo Resch GmbH, Gräfelfing 1996
- /45/ Niegsch, J.: Schüttgutbewegung und Wärmeübertragung im Wanderbett, Dissertation, Shaker Aachen 1993
- /46/ Nilles, M.: Wärmeübertragung an der Wand durchströmter Schüttungsrohre, Fortschr.-Ber. VDI-Reihe 3 Nr. 264, VDI-Verlag Düsseldorf 1991
- /47/ Oettel, E.: Stand der Biomassevergasung in Deutschland, DGMK-Fachbereichstagung „Energetische Nutzung von Biomassen“, Vehlen 2002
- /48/ Peters, B.; Krebs, L.: Ein partikelauflösender Ansatz zur Simulation der Festbettverbrennung in 20. Deutscher Flammentag, Essen 2001, VDI Berichte 1629, Springer-VDI-Verlag Düsseldorf 2001

- /49/ Peters, W.: Kohlevergasung - Bestehende Verfahren und neue Entwicklungen, Verlag Glückauf Essen 1981
- /50/ Pfab, F.: Vergasung biogener Feststoffe in einem Wirbelkammerreaktor, Dissertation TU Berlin 2001
- /51/ Quang, N. T.: Pyrolyse und Verbrennung der Brennstoffe und Brennstoffgemische in zirkulierenden Wirbelschichtfeuerungen - Experiment und Modellierung, Dissertation TU Dresden - Institut für Energietechnik 1999
- /52/ Quang, N. T.; Koppe, K.; Brunne, T.; Kaplonek, M.: Pyrolyseverhalten fester Brennstoffe und Brennstoffgemischen in einer im Labormaßstab vorhandenen stationären Wirbelschicht, Versuchsbericht Inst. f. Energietechnik, TU Dresden 1997
- /53/ Reina, J.; Velo, E.; Puigjaner, L.: Kinetic Study of the Pyrolysis of Waste Wood, Ind. Eng. Chem. Res. 37/1998
- /54/ Rexroth, C.-H.: Was bietet CFD? Einführung und Überblick zur Numerischen Strömungssimulation, in Computersimulation von Strömungen und Wärmetransportprozessen in der Energietechnik, VDI-GET-Workshop, Düsseldorf 2001
- /55/ Rottschäfer, K.: Geschwindigkeitsverteilungen in durchströmten Füllkörperschüttungen, Fortschr.-Ber. VDI-Reihe 3 Nr. 464, VDI-Verlag Düsseldorf 1997
- /56/ Schläpfer, P.; Tobler, J.: Theoretische und praktische Untersuchungen über den Betrieb von Motorfahrzeugen mit Holzgas, Schweizerische Gesellschaft für das Studium der Motorbrennstoffe, Bern 1937
- /57/ Schlünder, E.-U.; Tsotsas, E.: Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgütern und Wirbelschichten, Thieme Stuttgart; New York 1988
- /58/ Schneider, M.: Untersuchung von Möglichkeiten zur Produktion eines wasserstoffreichen Brenngases durch Holzvergasung, Großer Beleg Nr. 696 am Inst. für Energietechnik, TU Dresden 1999
- /59/ Schneider, M.; Bernstein, W.; Hiller, A.; Klemm, M.: Experimentelle und mathematische Modellierung der Biomassen-Festbettvergasung und einer anschließenden Gasreinigung in DGMK-Tagungsbericht Energetische Nutzung von Biomassen, Vehlen/Westf. 2002

- /60/ Schulze Lammers, P.: Kenngrößen der thermischen Gegenstromvergasung von Weizenstroh und ausgewählten Holzbrennstoffen, Dissertation Eigenverlag Freising-Weihenstephan 1984
- /61/ Schweitzer, F. J.: Thermoselect-Verfahren zur Ent- und Vergasung von Abfällen, EF-Verlag Berlin 1994
- /62/ Steinmetz, E.: Kohlevergasung und -verflüssigung, Haus der Technik - Vortragsveröffentlichung, Vulkan Verlag Essen 1991
- /63/ Stephan, K.; Mayinger, M.: Thermodynamik Band 2: Mehrstoffsysteme und chem. Reaktion, Springer-Verlag Berlin 1988
- /64/ Thome-Kozmiensky, K. J.: Reaktoren zur thermischen Abfallbehandlung, EF-Verlag Berlin 1993
- /65/ Toufar, W.: Die Modellierung der Festbettvergasung - ein Beitrag zur mathematischen Beschreibung von Schachtofenprozessen, Dissertation Bergakademie Freiberg 1978
- /66/ Tsotsas, E.: Über die Wärme- und Stoffübertragung in durchströmten Festbetten, Fortschr.-Ber. VDI-Reihe 3 Nr. 223, VDI-Verlag Düsseldorf
- /67/ TU Dresden, Professur für Kraftwerkstechnik, Script zur Lehrveranstaltung Verbrennung und Dampferzeugung, Dresden 1998
- /68/ Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry - Volume A12, VCH Verlag Weinheim, New York 1989
- /69/ Vauk, W. R. A.: Grundoperationen chemischer Verfahrenstechnik, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig 1992
- /70/ VER-GmbH: Dokumentation Versuchsvergaser mit 75 kW Brennstoffleistung, 2000
- /71/ Verbrennung und Feuerungen -19. Flammentag Dresden, VDI-Berichte 1492, VDI-Verlag Düsseldorf 1999
- /72/ Verein Deutscher Ingenieure: VDI-Wärmeatlas, VDI-Verlag Düsseldorf 1994
- /73/ VDI-Energietechnik: Energietechnische Arbeitsmappe, Springer Verlag Berlin Heidelberg 2000
- /74/ Warnatz, J., Maas, U.: Techn. Verbrennung - Phys.-chem Grundlagen, Modellbildung, Schadstoffentstehung, Springer-Verlag Berlin 1993
- /75/ Wedler, G.: Lehrbuch der physikalischen Chemie, VCH-Verlag Weinheim 1987
- /76/ Werner, K.: Wärmeübertragung in durchströmten Wabenkörpern, Fortschr.-Ber. VDI-Reihe 3 Nr. 306, VDI-Verlag Düsseldorf 1993

- /77/ Wilhelm, R.: Einfluß auf die Produktgaszusammensetzung in einem Festbettvergaser durch Brennstoffvariation, Diplomarbeit, TU Dresden 2002
- /78/ Wolf, Gert; Schneider, Wolfgang: Chemische Thermodynamik, Arbeitsbuch 4, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig 1985
- /79/ Wurzenberger, J. C.; Wallner, S.; Raupemstrauch, H.: Mathematische Modellierung einer Festbettfeuerungsanlage mittels eines kombinierten Partikel/Reaktor-Modells in 20. Deutscher Flammentag, Essen 2001, VDI Berichte 1629, Springer-VDI-Verlag Düsseldorf 2001